

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A KOMUNIKAČNÍCH TECHNOLOGIÍ
ÚSTAV TELEKOMUNIKACÍ

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION
DEPARTMENT OF TELECOMMUNICATIONS

VYUŽITÍ ŘÍDKÉ REPREZENTACE SIGNÁLU PŘI SNÍMÁNÍ A
REKONSTRUKCI V NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÉ REZONANCI

DIPLOMOVÁ PRÁCE
MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

Bc. RADEK HRBÁČEK

BRNO 2013



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A KOMUNIKAČNÍCH
TECHNOLOGIÍ
ÚSTAV TELEKOMUNIKACÍ

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION
DEPARTMENT OF TELECOMMUNICATIONS

VYUŽITÍ ŘÍDKÉ REPREZENTACE SIGNÁLU PŘI SNÍMÁNÍ A REKONSTRUKCI V NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÉ REZONANCI

EXPLOITING SPARSE SIGNAL REPRESENTATIONS IN CAPTURING AND RECOVERY OF
NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE DATA

DIPLOMOVÁ PRÁCE
MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

Bc. RADEK HRBÁČEK

VEDOUcí PRÁCE
SUPERVISOR

Mgr. PAVEL RAJMÍČ, Ph.D.

BRNO 2013



VYSOKÉ UČENÍ
TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta elektrotechniky
a komunikačních technologií

Ústav telekomunikací

Diplomová práce

magisterský navazující studijní obor
Telekomunikační a informační technika

Student: Bc. Radek Hrbáček

ID: 119440

Ročník: 2

Akademický rok: 2012/2013

NÁZEV TÉMATU:

Využití řídké reprezentace signálu při snímání a rekonstrukci v nukleární magnetické rezonanci

POKYNY PRO VYPRACOVÁNÍ:

Nastudujte základy tzv. řídké reprezentace signálů. Seznamte se s problematikou spektroskopie pomocí magnetické rezonance. Nasimulujte spektra několika základních sloučenin a proveďte testy separace těchto dat. Navrhněte schéma získání vzorků založené na komprimovaném snímání a/nebo "low rank matrix completion", implementujte v prostředí Matlab a vyhodnoťte výsledky na umělých i reálných datech.

DOPORUČENÁ LITERATURA:

[1] Mohammad Golbabaee, Pierre Vandergheynst, Compressed Sensing of Simultaneous Low-Rank and Joint-Sparse Matrices, preprint, 2012

[2] E. J. Candes, J. Romberg and T. Tao. Stable signal recovery from incomplete and inaccurate measurements. Comm. Pure Appl. Math., 59, 1207-1223.

Termín zadání: 11.2.2013

Termín odevzdání: 29.5.2013

Vedoucí práce: Mgr. Pavel Rajmic, Ph.D.

Konzultanti diplomové práce:

prof. Ing. Kamil Vrba, CSc.

Předseda oborové rady

UPOZORNĚNÍ:

Autor diplomové práce nesmí při vytváření diplomové práce porušit autorská práva třetích osob, zejména nesmí zasahovat nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a musí si být plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č.40/2009 Sb.

ABSTRAKT

Tato práce se věnuje problematice nukleární magnetické rezonance, zejména spektroskopii a spektroskopickému zobrazování, řídké reprezentaci signálů a aproximaci s nízkou hodnotí. Využití spektroskopických zobrazovacích metod v klinické praxi se stává čím dál populárnější, jeho rozšíření však stále brání zejména dlouhé časy měření a nízké rozlišení. Práce se zabývá využitím řídké reprezentace signálů a reprezentace s nízkou hodnotí pro vylepšení stávajících zobrazovacích metod. Fenomén komprimovaného snímání je nejprve demonstrován na příkladu zobrazování pomocí magnetické rezonance a při hyperspektrálním zobrazování. Následně je navrženo schéma získávání spektroskopických dat založené na komprimovaném snímání. Práce se dále zabývá návrhem algoritmu MRSMP pro kvantifikaci in vivo spekter.

KLÍČOVÁ SLOVA

nukleární magnetická rezonance, spektroskopie, spektroskopické zobrazování, řídká reprezentace signálů, komprimované snímání, aproximace s nízkou hodnotí

ABSTRACT

This thesis deals with the nuclear magnetic resonance field, especially spectroscopy and spectroscopy imaging, sparse signal representation and low-rank approximation approaches. Spectroscopy imaging methods are becoming very popular in clinical praxis, however, long measurement times and low resolution prevent them from their spreading. The goal of this thesis is to improve state of the art methods by using sparse signal representation and low-rank approximation approaches. The compressed sensing technique is demonstrated on the examples of magnetic resonance imaging speedup and hyperspectral imaging data saving. Then, a new spectroscopy imaging scheme based on compressed sensing is proposed. The thesis deals also with the in vivo spectrum quantitation problem by designing the MRSMP algorithm specifically for this purpose.

KEYWORDS

nuclear magnetic resonance, spectroscopy, spectroscopy imaging, sparse signal representation, compressed sensing, low-rank approximation

HRBÁČEK, Radek *Využití řídké reprezentace signálu při snímání a rekonstrukci v nukleární magnetické rezonanci*: diplomová práce. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Ústav telekomunikací, 2013. 108 s. Vedoucí práce byl Mgr. Pavel Rajmic, Ph.D.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že svou diplomovou práci na téma „Využití řídké reprezentace signálu při snímání a rekonstrukci v nukleární magnetické rezonanci“ jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Jako autor uvedené diplomové práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této diplomové práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a/nebo majetkových a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), ve znění pozdějších předpisů, včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č. 40/2009 Sb.

Brno

.....

(podpis autora)

PODĚKOVÁNÍ

Rád bych poděkoval vedoucímu diplomové práce panu Mgr. Pavlu Rajmicovi, Ph.D. za odborné vedení, konzultace, trpělivost a podnětné návrhy k práci. Dále bych chtěl poděkovat Ing. Zenonu Starčukovi a Dr. Ing. Janě Starčukové, CSc. za pomoc se simulátorem jMRUI a za odborné rady v oblasti nukleární magnetické rezonance.

Brno

.....

(podpis autora)

OBSAH

1	Úvod	12
2	Nukleární magnetická rezonance	13
2.1	Fyzikální princip	13
2.1.1	Spin elementárních částic	13
2.1.2	Spin složených částic	14
2.1.3	Spin atomů	14
2.1.4	Magnetický moment	15
2.1.5	Chování jader ve vnějším magnetickém poli	15
2.1.6	Chemický posun	17
2.1.7	Multiplicita signálů	18
2.2	Technika a snímání dat	21
2.2.1	Relaxační proces	22
2.2.2	RF pulzy	23
2.3	Základní zobrazovací techniky	25
2.3.1	NMR spektroskopie	25
2.3.2	In vivo NMR spektroskopie	28
2.3.3	Magnetická rezonance	30
2.3.4	Magnetické rezonanční spektroskopické zobrazování	34
2.4	Typické problémy a jejich řešení	37
2.4.1	Nehomogenita magnetického pole	37
2.4.2	Decoupling	38
2.4.3	Potlačení signálu vody a tuku	39
3	Konvenční metody zpracování signálů v magnetické rezonanci	40
3.1	Harmonická analýza	40
3.1.1	Fourierova transformace	40
3.1.2	Diskrétní Fourierova transformace	41
3.1.3	Rychlá Fourierova transformace	42
3.1.4	Vícerozměrná Fourierova transformace	43
3.1.5	Vícerozměrná diskrétní Fourierova transformace	43
3.2	Rekonstrukce obrazu MRI	44
3.2.1	Rekonstrukce pomocí DFT	44
3.2.2	Zpětná projekce	45
3.3	Zpracování NMR spekter	48
3.3.1	Kvantifikace ve frekvenční oblasti	48
3.3.2	Kvantifikace v časové oblasti	49

3.3.3	Předzpracování dat	49
4	Řídká reprezentace signálů	50
4.1	Značení a výchozí fakta	50
4.2	Řídká řešení systémů lineárních rovnic	52
4.2.1	Postačující podmínky pro jednoznačnost řešení	53
4.2.2	Výpočetní složitost problému (P0)	56
4.3	ℓ_1 -relaxace	56
4.3.1	Podmínky ekvivalence řešení ℓ_0 - a ℓ_1 -minimalizace	56
4.3.2	Matice vyhovující RIP	61
4.4	Algoritmy pro hledání řídkých řešení	62
4.4.1	Relaxační algoritmy	62
4.4.2	Žravé algoritmy	63
4.4.3	Hybridní algoritmy	65
4.5	Komprimované snímání	65
5	Reprezentace signálů s nízkou hodnotí	69
5.1	Analýza hlavních komponent	69
5.2	Aproximace s nízkou hodnotí	71
5.3	Hyperspektrální zobrazování	71
6	Reprezentace signálů v NMR	74
6.1	Zrychlení MRI	74
6.2	Využití v MRS a MRSI	77
6.2.1	Program jMRUI	77
6.2.2	Návrh měřicí sekvence	81
6.2.3	Kvantifikace MRS spekter pomocí řídké reprezentace	83
6.2.4	Kvantifikace prostorově lokalizovaných spekter	88
6.2.5	Komprimované snímání v MRSI	89
7	Závěr	93
	Literatura	94
	Seznam symbolů, veličin a zkratk	99
	Seznam příloh	102
A	MATLAB skripty	103
A.1	Vytvoření slovníku ze simulovaných dat	103
A.2	Vizualizace slovníku	103

A.3	Zobrazení Grammovy matice slovníku	104
A.4	Implementace algoritmu OMP	104
A.5	Implementace algoritmu MRSMP	105
A.6	Kvantifikace spektra pomocí algoritmu MRSMP	105
B	Obsah CD	108

SEZNAM OBRÁZKŮ

2.1	Vizualizace momentu hybnosti částice.	14
2.2	Rozdělení energetických hladin stavů magnetického momentu	16
2.3	Částice s nenulovým spinem v magnetickém poli.	18
2.4	Strukturní vzorce sloučenin tetramethylsilanu a neopentanu a jejich chemický posun.	19
2.5	Molekuly 1,2-dichlorethanu a 1,1-dichlorethanu a jejich spektra.	20
2.6	Signál FID	21
2.7	Vektor magnetizace \vec{M} rozložený na podélnou \vec{M}_z a příčnou \vec{M}_{xy} složku.	22
2.8	T1 a T2 relaxace.	23
2.9	Obdélníkový radiofrekvenční pulz.	24
2.10	SINC radiofrekvenční pulz.	25
2.11	Nejjednodušší sekvence – 90° RF pulz následován vzorkováním.	26
2.12	Rotace vektoru magnetizace v rovině xy	26
2.13	Spin echo.	27
2.14	Strukturní vzorce vybraných metabolitů.	29
2.16	Výběr vrstvy v MRI.	31
2.17	Fázové zakódování v MRI	31
2.18	k -prostor.	32
2.19	Fázové zakódování v k -prostoru.	32
2.20	Frekvenční zakódování v MRI	33
2.21	Trajektorie v k -prostoru.	34
2.22	MRI obraz banánu.	34
2.23	Proces výběru voxelu v jednovoxelové spektroskopii.	35
2.24	Jednovoxelová metoda STEAM.	35
2.25	Jednovoxelová metoda PRESS.	36
2.26	Mapy metabolitů v mozku.	37
2.27	Potlačení signálu vody pomocí metody CHESS.	39
3.1	Twiddle faktory tvoří body na jednotkové kužnici v komplexní rovině.	42
3.2	Motýlkový diagram pro FFT délky $N = 4$ (radix-2 DIT).	43
3.3	Schéma Radonovy transformace – projekce obrazu podél přímk.	45
3.4	Shepp-Loganův fantom pixelů a jeho Radonova transformace.	46
3.5	Vztah Radonovy a Fourierovy transformace.	46
3.6	Srovnání rekonstrukce pomocí zpětné projekce a filtrované zpětné projekce.	47
4.1	Ilustrace jednotkových koulí B_0^2 , $B_{0,5}^2$, B_1^2 a B_2^2	52
4.2	Schéma nedourčeného systému rovnic $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$	53
4.3	„Nafukující se“ koule v normách ℓ_0 , $\ell_{0,5}$, ℓ_1 a ℓ_2	57

4.4	Vizualizace norem: $\ell_{0,5}$, ℓ_1 , ℓ_2	58
4.5	Příklad matice \mathbf{R} , která vznikla z jednotkové matice $N \times N$ náhodným ponecháním pouze m řádků.	66
4.6	Ilustrace situace při komprimovaném snímání	67
4.7	Vizualizace podmínky úspěšné rekonstrukce.	67
5.1	Příklad použití PCA na obrázky obličejů.	70
5.2	Rekonstrukce obličeje pomocí několika hlavních komponent.	70
6.1	Spirální trajektorie v k -prostoru.	74
6.2	Shepp-Loganův fantom.	75
6.3	Rekonstrukce pomocí zpětné projekce a algoritmu OMP.	76
6.4	Program jMRUI po spuštění.	77
6.5	Zadávání vlastností molekuly v programu jMRUI.	78
6.6	Popis experimentu v programu jMRUI.	79
6.7	Zobrazení měřicí sekvence v programu jMRUI.	79
6.8	Výsledek simulace v programu jMRUI.	80
6.9	Správně korigovaná fáze signálu v programu jMRUI.	80
6.10	Výsledná sekvence STEAM pro jednovoxelovou spektroskopii.	82
6.11	Spektra vybraných metabolitů vytvořené simulací v programu jMRUI.	84
6.12	Srovnání spekter metabolitu glutamátu pro různé hodnoty relaxač- ního času T_2	85
6.13	Grammova matice vytvořeného slovníku.	86
6.14	Kvantifikace MRS spekter pomocí algoritmu MRSMP.	88
6.15	Vizualizace zpracování MRSI spekter.	89
6.16	Princip vytváření náhodné excitační masky v MRSI.	90
6.17	Příklad měřicí matice komprimovaného snímání v MRSI.	90

SEZNAM TABULEK

2.1	Přehled elementárních a složených částic a jejich spinů.	15
2.2	Gyromagnetické poměry γ_n a spinová kvantová čísla s jader některých prvků.	16
2.3	Pascalův trojúhelník a jeho vztah k multiplicitě signálu.	20
2.4	Přehled typických shimovacích cívek.	38

1 ÚVOD

Když v první polovině dvacátého století vědci poprvé pozorovali jev nazývaný nukleární magnetická rezonance (NMR), jistě si nedokázali představit, jak obrovský význam bude tento objev mít o pár desítek let později. Postupem času vznikla celá řada technik využívajících právě tento jev – dnes by se bez nich neobešla analytická chemie a významnou roli hrají i v medicíně.

Díky svému neinvazivnímu charakteru a absenci ionizujícího záření je magnetická rezonance budoucností lékařské diagnostiky. Dnešní technologie však zatím neumožňují zcela nahradit ostatní diagnostické metody, jako např. výpočetní tomografii (CT), neboť výrazným omezením NMR je jeho časová náročnost. Přesto jsou stále více používány metody *in vivo* spektroskopického zobrazování k včasné diagnostice závažných onemocnění postihující dnešní populaci (rakovina, Alzheimerova choroba apod.).

O mnoho let později po objevení jevu nukleární magnetické rezonance se s rozvojem výpočetní techniky začínala rozvíjet oblast zpracování číslicových signálů. Právě díky počítačovému zpracování dat bylo možné významně urychlit vědecký výzkum. Byly vynalezeny techniky zobrazování pomocí NMR, které se bez výpočetních prostředků neobejdou.

Základním kamenem číslicového zpracování signálů byl od počátku vzorkovací teorém stanovující minimální vzorkovací periodu pro dokonalou rekonstrukci signálu. Tento teorém je obecně platný a nebere v úvahu žádnou apriorní znalost o signálu. Před nedávnem se začal rozvíjet zcela nový přístup ke zpracování signálů využívající empirického faktu, že mnohé signály, ať už obrazové, zvukové či jiné, mají svou řídkou reprezentaci v nějaké oblasti. Tato apriorní informace o signálech umožňuje snížit nároky na jejich pořizování, důsledkem čehož může dojít k úspoře prostředků nebo času.

Tato práce se zabývá využitím řídké reprezentace signálů v NMR, a to jak při samotném procesu snímání dat, tak při jejich následném zpracování. Úvodní kapitola 2 se zabývá fyzikálním pozadím a zobrazovacími technikami na principu NMR. Následuje stručná rekapitulace konvenčních metod zpracování signálů v kapitole 3. Kapitola 4 představuje fenomén řídké reprezentace signálů, následující kapitola 5 se pak zabývá reprezentací signálů s nízkou hodnotí. Využití řídkých reprezentací a nízké hodnoty signálů v NMR se věnuje kapitola 6.

2 NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÁ REZONANCE

Nukleární magnetická rezonance, anglicky Nuclear Magnetic Resonance (NMR), je fyzikální jev, při kterém jsou jádra s nenulovým magnetickým momentem buzena elektromagnetickým polem a pod vlivem homogenního magnetického pole určité intenzity pak rezonují na specifických frekvencích.

Tento jev byl poprvé pozorován roku 1938 americkým fyzikem pocházejícím z Halli Isidorem Isaacem Rabim, za což roku 1944 obdržel Nobelovu cenu. Na jeho práci navázali Švýcar Felix Bloch a Američan Edward Mills Purcell (sílají Nobelovu cenu z roku 1952), kterým se podařilo tento jev pozorovat kromě molekulárního svazku také v kapalinách a pevných látkách a poprvé detekovali NMR signál. Teprve nástup počítačů ale umožnil využít potenciálu této techniky naplno. O použití Fourierovy transformace se zasloužil Richard R. Ernst, který také obdržel Nobelovu cenu [44]. Následný rychlý vývoj přinesl metody s vysokým spektrálním rozlišením, dvou-dimenzionální techniky, zobrazování magnetickou rezonancí (MRI) a v posledních letech se rozvíjí dokonce spektroskopické zobrazování.

Metoda původně používaná především v analytické chemii a biochemii je dnes nedílnou součástí lékařské diagnostiky.

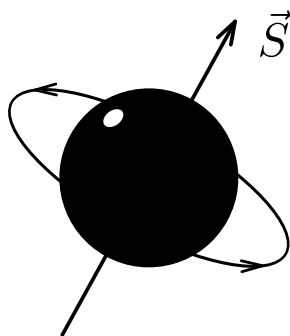
2.1 Fyzikální princip

Pro pochopení základního principu nukleární magnetické rezonance je nutné rozumět základům kvantové mechaniky. Následující kapitoly proto budou věnovány vybraným vlastnostem částic v kvantovém světě.

2.1.1 Spin elementárních částic

Každá elementární částice je charakterizována svými kvantovými čísly. Jedním z nich je *spinové kvantové číslo*, které určuje vnitřní moment hybnosti částice. Jeho velikost je pro daný typ částice pevně daná a nabývá hodnot $s \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$. Vlastní moment hybnosti částice (*spin*) pak nabývá diskrétních hodnot $\mathbf{S} = \sqrt{s(s+1)}\hbar$, kde $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ je redukovaná Planckova konstanta [27].

Podobně jako moment hybnosti v klasické mechanice, i v kvantové mechanice má spin kromě velikosti také směr (viz obr. 2.1). Oproti klasické mechanice však složky momentu hybnosti v jednotlivých osách mohou nabývat pouze hodnot $S_i = \hbar s_i$, kde $s_i \in \{-s, -(s-1), \dots, s-1, s\}$ je projekce spinového kvantového čísla s do osy i . Tradičně volíme osu z jako osu „rotace“, s_z pak nabývá celkem $2s+1$ možných hodnot a označujeme je jako *magnetické kvantové číslo* m .



Obr. 2.1: Vizualizace momentu hybnosti částice.

Veškerá známá hmota je tvořena elementárními částicemi nazývanými *fermiony* se spinovým kvantovým číslem $s = \frac{1}{2}$, s_z tedy nabývá pouze dvou možných hodnot $s_z = -\frac{1}{2}$ (spin nahoru) a $s_z = +\frac{1}{2}$ (spin dolů). Mezi tyto částice patří *elektron* e^- , *pozitron* p^+ , dále pak *neutrino* ν a zejména *kvarky* q tvořící složené částice (*hadrony*), mezi něž patří především *protony* p a *neutrony* n tvořící jádro atomu [27].

Fermiony mohou absorbovat a emitovat jiné elementární částice – *bosony* – a tím vytvářet základní interakce Standardního modelu částicové fyziky.¹ Bosony mají oproti fermionům celočíselné spinové kvantové číslo $s \in \{0, 1, 2, \dots\}$.

2.1.2 Spin složených částic

Spin složených částic je jednoduše součtem spinů jednotlivých komponent, ovšem momenty hybnosti je nutné sčítat vektorově, tedy samostatně ve všech osách. Ve výsledku pak záleží na orientaci spinů jednotlivých komponent. Například v nukleonech (tedy protonech a neutronech) má vždy jeden ze tří kvarků opačný spin oproti ostatním a výsledný spin je potom $\frac{1}{2}$, zatímco *delta baryony* Δ mají spiny všech kvarků orientovány souhlasně a výsledný spin těchto částic je roven $\frac{3}{2}$ [27].

Tabulka 2.1 přehledně shrnuje rozdělení elementárních a složených částic do jednotlivých skupin, uvádí zástupce těchto skupin a jejich možná spinová kvantová čísla.

2.1.3 Spin atomů

Každý atom obsahuje ve svém jádru určitý počet protonů a neutronů. Atomový obal je pak složen z elektronů, jejichž počet odpovídá počtu protonů (u elektricky neutrální částice). Počet protonů určuje chemický prvek, počet neutronů pak jeho

¹Standardní model částicové fyziky je teorie popisující silnou, slabou a elektromagnetickou interakci, která je v souladu s kvantovou mechanikou i speciální teorií relativity. Standardní model není kompletní teorií všech základních interakcí, protože nepočítá s gravitací.

Tab. 2.1: Přehled elementárních a složených částic a jejich spinů.

skupina			zástupci	spin
elementární	fermiony	kvarky	u, d, c, s, t, b	$s = \frac{1}{2}$
		leptony	elektron , mion, tauon, neutrina	$s = \frac{1}{2}$
	bosony	výměnné	foton, gluon, bosony W a Z,	$s = 1$
		skalární	Higgsův boson	$s = 0$
složené	hadrony	baryony	proton , neutron , Δ , Λ , Σ , Ξ , Ω	$s \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots\}$
		mezony	π , ρ , η , ϕ , ω , J/ψ , ψ , K, B, D, T	$s \in \{0, 1, 2, \dots\}$

izotop. Stejně jako elementární a složené částice, i atomy mají svůj spin. Pokud je nukleonové číslo (počet všech nukleonů, tedy protonů a neutronů) liché, je celkový spin atomu roven lichému násobku jedné poloviny (např. ^1H nebo ^{13}C), je-li počet protonů i neutronů lichý, je spin celočíselný (např. ^2H). Je-li však počet protonů i neutronů sudý, je celkový spin nulový (např. ^{12}C nebo ^{16}O) [27].

2.1.4 Magnetický moment

Nenulový spin libovolné částice je vždy spojen s nenulovým magnetickým momentem $\vec{\mu}$ vztahem $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$, kde γ je *gyromagnetický poměr*. z -ová složka magnetického momentu μ_z je pak rovna $\mu_z = \gamma S_z = \gamma m \hbar$ [44]. Každá částice má vlastní hodnotu gyromagnetického poměru danou vztahem $\gamma = \frac{g_s q}{2m}$, kde g_s je tzv. spinový g -faktor definující vztah pozorovaného magnetického momentu a momentu hybnosti. Dále pak q označuje elektrický náboj částice, m jeho hmotnost a \vec{S} již známý moment hybnosti (spin). Gyromagnetické poměry jader vybraných prvků jsou uvedeny v tabulce 2.2.

2.1.5 Chování jader ve vnějším magnetickém poli

Pokud není jádro umístěno ve vnějším magnetickém poli, všechny stavy magnetického momentu dané magnetickým spinovým číslem mají stejnou energii, tyto energetické hladiny jsou tzv. degenerované. Umístěním jádra s nenulovým spinem do vnějšího magnetického pole o indukcii \mathbf{B}_0 , dojde k interakci vnějšího magnetického pole s magnetickým momentem jádra. Nyní již tyto stavy nemají stejnou energii, energie magnetického momentu $\vec{\mu}$ umístěného do magnetického pole \vec{B}_0 je dána:

$$E = -\vec{\mu} \mathbf{B}_0 = -\mu_x B_{0x} - \mu_y B_{0y} - \mu_z B_{0z}. \quad (2.1)$$

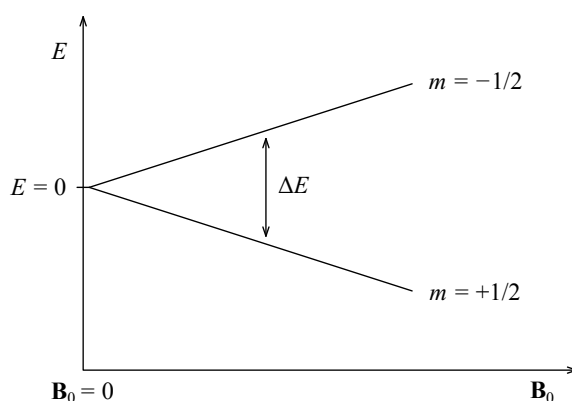
Obvykle však volíme směr osy z podél směru magnetického pole B_0 , pak lze energii vyjádřit jednoduše jako:

$$E = -\mu_z B_0 = -\gamma m \hbar B_0. \quad (2.2)$$

Tab. 2.2: Gyromagnetické poměry γ_n a spinová kvantová čísla s jader některých prvků.

jádro	přírodní výskyt	spin	γ_n [rad · s ⁻¹ · T ⁻¹]
¹ H	99,985 %	$\frac{1}{2}$	$267,513 \cdot 10^6$
² H	0,015 %	1	$41,065 \cdot 10^6$
³ H	umělý izotop	$\frac{1}{2}$	$285,350 \cdot 10^6$
³ He	0,000137 %	$\frac{1}{2}$	$-203,789 \cdot 10^6$
⁴ He	99,999863 %	0	
⁷ Li	92,5 %	$\frac{3}{2}$	$103,962 \cdot 10^6$
¹² C	98,89 %	0	
¹³ C	1,07 %	$\frac{1}{2}$	$67,262 \cdot 10^6$
¹⁴ N	99,634 %	1	$19,331 \cdot 10^6$
¹⁵ N	0,366 %	$\frac{1}{2}$	$-27,116 \cdot 10^6$
¹⁶ O	99,76 %	0	
¹⁷ O	0,039 %	$\frac{5}{2}$	$-36,264 \cdot 10^6$
¹⁹ F	100 %	$\frac{1}{2}$	$251,662 \cdot 10^6$
²³ Na	100 %	$\frac{3}{2}$	$70,761 \cdot 10^6$
³¹ P	100 %	$\frac{1}{2}$	$108,291 \cdot 10^6$
¹²⁹ Xe	26,4 %	$\frac{1}{2}$	$-73,997 \cdot 10^6$

V nenulovém magnetickém poli jsou tedy odlišné stavy spinu rozlišeny rozdílem energetických hladin $\Delta E = E_{-\frac{1}{2}} - E_{+\frac{1}{2}} = 2 \cdot \gamma \frac{1}{2} \hbar \mathbf{B}_0 = \gamma \hbar \mathbf{B}_0$ (viz obr. 2.2), mluvíme o orientaci magnetického momentu ve směru resp. proti směru vnějšího magnetického pole. Orientace ve směru vnějšího magnetického pole je energeticky výhodnější, proto se jádra snaží zaujmout tuto orientaci. Při teplotě absolutní nuly bude v rovno-



Obr. 2.2: S rostoucí indukcí magnetického pole \mathbf{B}_0 roste i rozdíl energetických hladin různých stavů magnetického momentu, v tomto případě je gyromagnetický poměr kladný a tedy stav $m = +\frac{1}{2}$ odpovídá nižší energetické hladině.

váženém stavu počet jader orientovaných v obou směrech stejný. Zvyšováním teploty však dochází k tepelnému pohybu atomů, který způsobuje, že jader orientovaných po směru magnetického pole bude nepatrně více. Přesný poměr počtu jader v obou stavech určuje Boltzmannův zákon:

$$p = e^{\frac{\Delta E}{kT}}, \quad (2.3)$$

kde ΔE je rozdíl energetických stavů v daném magnetickém poli \vec{B}_0 , $k = 1,3805 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ je Boltzmannova konstanta a T je termodynamická teplota [44].

Vlivem interakce vnějšího magnetického pole s magnetickým momentem jader vzniká precesní pohyb vektoru magnetického momentu μ kolem směru pole \vec{B}_0 s frekvencí označovanou jako *Larmorova frekvence* (viz obr. 2.3). Pokud jádra vystavíme elektromagnetickému záření o této frekvenci, dojde k absorpci energie a přechodu z nižší energetické hladiny do vyšší. Záření tedy musí mít frekvenci odpovídající rozdílu energetických hladin daného jádra v poli \vec{B}_0 , tu lze vyjádřit pomocí Planckova vztahu:

$$E = h\nu, \quad (2.4)$$

kde h je Planckova konstanta a E je energie fotonu odpovídající elektromagnetickému vlnění o frekvenci ν . V našem případě musím mít foton energii $\Delta E = \gamma \hbar \mathbf{B}_0$ a tedy Larmorova frekvence je rovna:

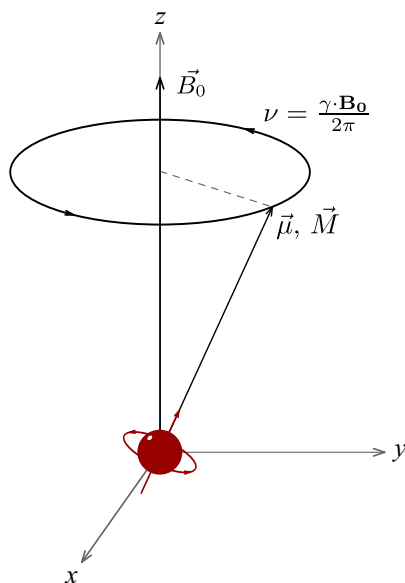
$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{\gamma \hbar \mathbf{B}_0}{h} = \frac{\gamma \mathbf{B}_0}{2\pi}. \quad (2.5)$$

2.1.6 Chemický posun

V předchozích kapitolách bylo vysvětleno, jakým způsobem jádra s nenulovým spinem interagují s vnějším magnetickým polem. Mohlo by se zdát, že všechna jádra jednoho izotopu rezonují na stejné frekvenci. Zatím ovšem nebyl brán v potaz elektronový obal atomu – elektrony v něm obsažené mají také svůj spin a přestože mají velmi malou hmotnost, vytvářejí magnetické pole opačného směru než je vnější magnetické pole \vec{B}_0 a tím stíní jádro od magnetického pole, v němž se nachází. Elektronový obal dvou jader stejného izotopu, avšak s jiným chemickým okolím, se liší rozložením elektronů a intenzita stínění označovaná σ se tedy nepatrně liší. Po započtení stínění elektrony je celkové magnetické pole působící na jádro nazýváno efektivní magnetické pole \vec{B}_{ef} a jeho indukce je:

$$\mathbf{B}_{ef} = \mathbf{B}_0 - \sigma \mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_0(1 - \sigma). \quad (2.6)$$

Působením magnetického pole různé intenzity se změní rozdíl energetických hladin stavů a tedy i rezonanční frekvence pro dané jádro. V praxi se *chemický posun*



Obr. 2.3: Umístěním částice s nenulovým spinem do magnetického pole \vec{B}_0 vzniká precesní pohyb vektoru magnetického momentu μ kolem směru pole \vec{B}_0 . Frekvence tohoto pohybu je označována jako Larmorova frekvence.

udává jako rozdíl mezi rezonančními frekvencemi zkoumané a nějaké referenční látky (pro jádra vodíku nejčastěji tetramethylsilan – viz obr. 2.4b). Vyjadřuje se pomocí vztahu:

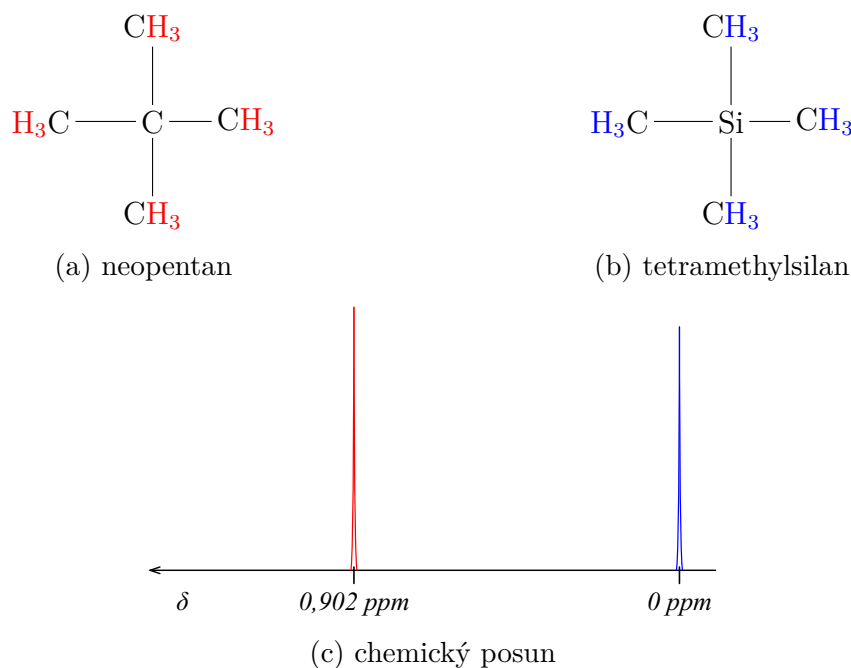
$$\delta_x = \frac{\nu_x - \nu_{ref}}{\nu_{ref}} \cdot 10^6, \quad (2.7)$$

kde δ_x je chemický posun jádra x , ν_x je jeho rezonanční frekvence a ν_{ref} je rezonanční frekvence referenční látky. Jednotkou takto definovaného chemického posunu je *ppm* (part per milion) a značnou výhodou této stupnice je nezávislost na indukci magnetického pole \mathbf{B}_0 .

Obrázek 2.4 ilustruje chemický posun na dvou velice podobných molekulách – neopentanu (2,3-dimethylpropanu) a tetramethylsilanu (TMS). Liší se pouze centrálním atomem, neopentan obsahuje atom uhlíku, tetramethylsilan pak atom křemíku. Atomy vodíku ve všech methylových skupinách mají stejné chemické okolí a proto jsou stejně stíněny. Spektrum každé z těchto molekul tedy tvoří pouze jedna spektrální čára. Atomy vodíku jsou však stíněny více v molekule neopentanu oproti molekule tetramethylsilanu a proto je chemický posun neopentanu $\delta = 0,902$ (viz obr. 2.4c).

2.1.7 Multiplicita signálů

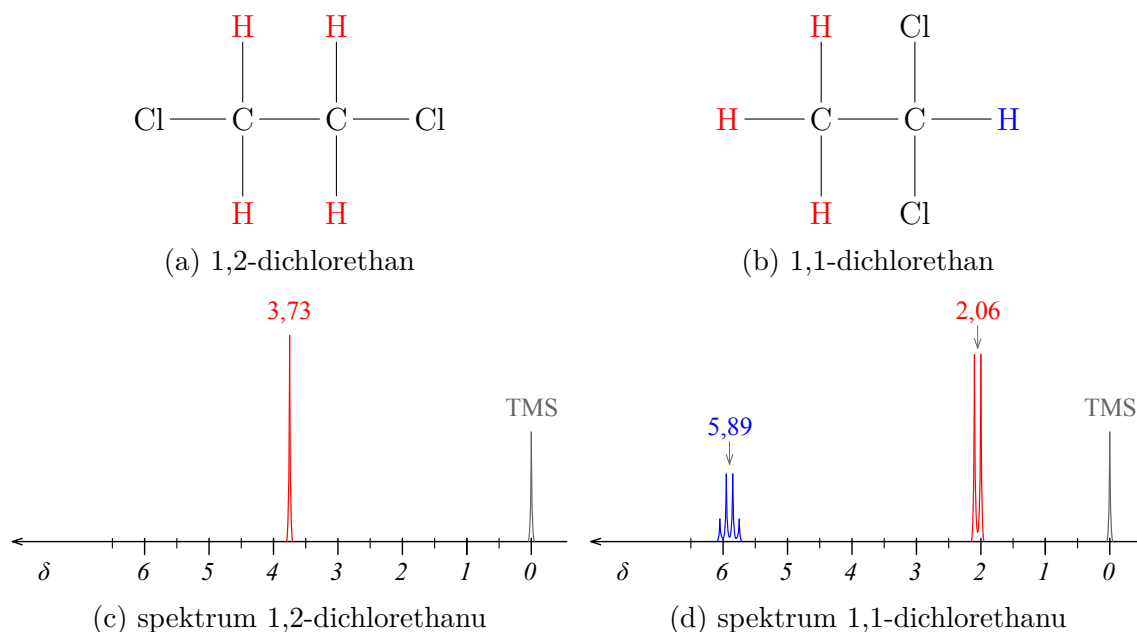
V případě, že jádra stejného typu nemají shodné chemické okolí, vzniká tzv. *multiplicita* signálu. Uvažujme dvě jádra vodíku (označme je H_a resp. H_b) s odlišným



Obr. 2.4: Strukturní vzorce sloučenin a) neopentanu a b) tetramethylsilanu a jejich c) chemický posun – červeně neopentan s posunem $\delta = 0,902$, modře tetramethylsilan s nulovým posunem.

chemickým okolím vázané na dva sousední atomy uhlíku. Jádru H_a může být orientováno ve směru nebo proti směru magnetického pole. Z pohledu jádra H_b je vnější magnetické pole ovlivněno orientací jádra H_a a tedy jádro H_b bude rezonovat na dvou blízkých frekvencích. Počet jader H_a orientovaných ve směru i proti směru je přibližně stejný, proto bude spektrum obsahovat místo jediné spektrální čáry tzv. *dublet*, tedy dvě spektrální čáry o stejné velikosti s rozstupem J Hz, kde J je tzv. *interakční konstanta* (coupling constant), jejíž velikost nezávisí na indukci magnetického pole \mathbf{B}_0 . Jádra H_a a H_b na sebe tímto způsobem působí vzájemně a tedy i působením jádra H_b je rozštěpeno spektrum jádra H_a .

Složitější případ je uveden na obr. 2.5. Zde v prvním případě 1,2-dichlorethanu (viz obr. 2.5a) k multiplicitě nedochází, protože všechna jádra vodíku zde mají stejné chemické okolí. Spektrum této sloučeniny tedy obsahuje jedinou čáru s chemickým posunem $\delta = 3,73$ (obr. 2.5c). 1,1-dichlorethan (obr. 2.5b) však již obsahuje 3 ekvivalentní jádra vodíku (označena červeně) a jedno jádro s odlišným okolím (modře). „Modré“ jádro se může nacházet ve dvou stavech – spin orientován po směru resp. proti směru vnějšího magnetického pole. Spektrum zbývajících „červených“ jader je tedy rozštěpeno a vzniká dublet. Komplikace nastává v opačném směru působení interakcí – počet 3 „červených“ jader nám dává celkový počet kombinací jejich stavů roven 8. Nevzniká však 8 spektrálních čar, neboť vzniklé čáry se překrývají a dochází



Obr. 2.5: Molekuly a) 1,2-dichlorethanu a b) 1,1-dichlorethanu a jejich spektra.

ke vzniku tzv. *kvartetu*, kde jednotlivé spektrální čáry jsou opět navzájem vzdálené o J Hz, ale jejich velikost je v poměru 1:3:3:1.

Kromě dubletů a kvartetů mohou vznikat také triplety, pentety, sextety, atd. Jejich vznik lze vysvětlit i jiným způsobem – kombinatoricky. Pro určení míry interakce skupiny jader s jiným jádrem je důležitý především celkový spin této skupiny jader. Pokud máme 3 jádra s možnými spiny $s_i \in \{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\}$, jejich celkový spin může nabývat pouze hodnot $s \in \{-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}\}$. Některé z těchto spinů mohou vznikat více kombinacemi jednotlivých jaderných spinů a proto je odpovídající spektrální čára větší. Pokud seřadíme singlet, dublet, triplet, atd. pod sebe, poměry spektrálních čar budou tvořit *Pascalův trojúhelník* (viz tabulka 2.3).

Tab. 2.3: Pascalův trojúhelník a jeho vztah k multiplicitě signálu.

1	singlet
1 1	dublet
1 2 1	triplet
1 3 3 1	kvartet
1 4 6 4 1	kvintet
1 5 10 10 5 1	sextet
1 6 15 20 15 6 1	septet

Pokud molekula obsahuje jádra stejného typu ve více než 2 různých chemických okolích, je potřeba počítat s více interakčními konstantami. Potom vznikají složitější

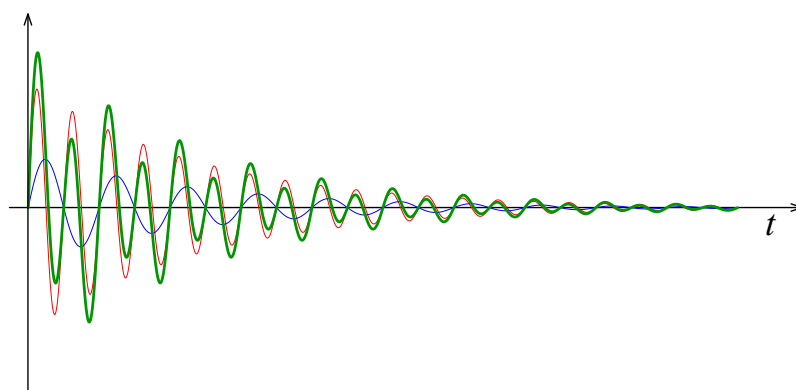
struktury kombinacemi základních struktur uvedených v tabulce 2.3. Můžeme se pak setkat např. s dubletem dubletů apod.

2.2 Technika a snímání dat

Dosud jsme se zabývali pouze teoretickými principy, tato kapitola se bude zabývat praktickými aspekty nukleární magnetické rezonance. V době, kdy teorie NMR začala vznikat, nebyly k dispozici počítače, měření tedy probíhalo poněkud jinak, než je tomu dnes.

Vzorek obsahující zkoumaná jádra s nenulovým spinem byl vložen do homogenního magnetického pole o indukci \mathbf{B}_0 a do jeho blízkosti byla umístěna cívka, kterou protékal střídavý proud. Frekvence proudu v cívce byla postupně zvyšována a při dosažení Larmorovy frekvence některých jader došlo k absorpci radiofrekvenčního záření, což bylo možné detekovat a zapsat příslušnou hodnotu zapisovačem. Druhou možností bylo spojitě měnit indukci magnetického pole \mathbf{B}_0 při konstantní frekvenci proudu cívkou. Takovému způsobu snímání dat se říká *Continuous Wave* (CW) spektroskopie.

Dnešní přístroje již pracují na jiném principu. Zkoumaná jádra jsou excitována úzkopásmovým radiofrekvenčním pulzem a při jejich navracení do ustáleného stavu vzniká tzv. *FID* (free induction decay, volné dozívání indukce), což je signál indukovaný do snímací cívky. FID je tvořen součtem sinusoid tlumených exponenciální funkcí, jednotlivé frekvence odpovídají rezonančním frekvencím jader. Jedná tedy o úzkopásmový signál v oblasti rádiových vln, který je nejprve nutné pomocí AD převodníku navzorkovat, uložit do počítače a následně pomocí matematických metod (Fourierovy transformace) analyzovat.



Obr. 2.6: Signál FID (free induction decay) je tvořen součtem sinusoid tlumených exponenciální funkcí, zde dvě složky (červená a modrá) tvoří v součtu výsledný FID (zeleně).

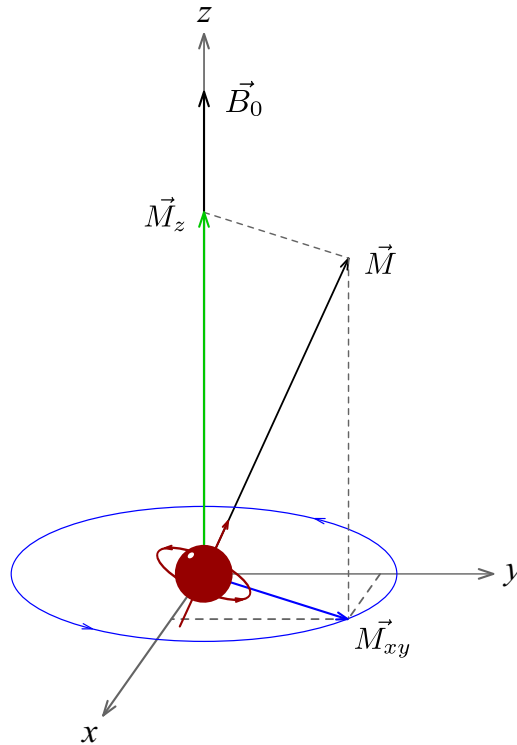
Magnetické pole \vec{B}_0 je vytvářeno supravodivými cívkami ponořenými do kapalného helia, indukce takového pole pak dosahuje až 21 T, u přístrojů používaných v medicíně jsou však používány magnety s indukcí 0,1–3 T.

2.2.1 Relaxační proces

Za ustáleného stavu jsou všechna jádra orientována ve směru resp. proti směru magnetického pole \vec{B}_0 a precesní pohyb tedy není pozorovatelný. Vystavením jader radiofrekvenčnímu pulzu je vektor magnetického momentu (a s ním i vektor magnetizace $\vec{M} = \frac{N}{V}\vec{\mu}$, kde N je počet magnetických momentů ve vzorku a V je objem vzorku) vychýlen z osy z a jeho precesní pohyb je detekovatelný, neboť průmět magnetického momentu \vec{M} do roviny xy je nenulový. Rotačním pohybem magnetického momentu M_{xy} je indukován elektrický proud do snímací cívky.

Rotaci magnetizace ilustruje obrázek 2.7, vektor magnetizace \vec{M} lze rozložit na součet vektorů podélné \vec{M}_z a příčné \vec{M}_{xy} magnetizace. Po vychýlení vektoru magnetizace z rovnovážného stavu o 90° je podélná složka magnetizace \vec{M}_z nulová. Působením magnetického pole \vec{B}_0 je však směr magnetizace \vec{M} postupně vracen do podélného směru a velikost \vec{M}_z postupně roste v čase t podle:

$$M_z = M_0(1 - e^{-t/T_1}), \quad (2.8)$$



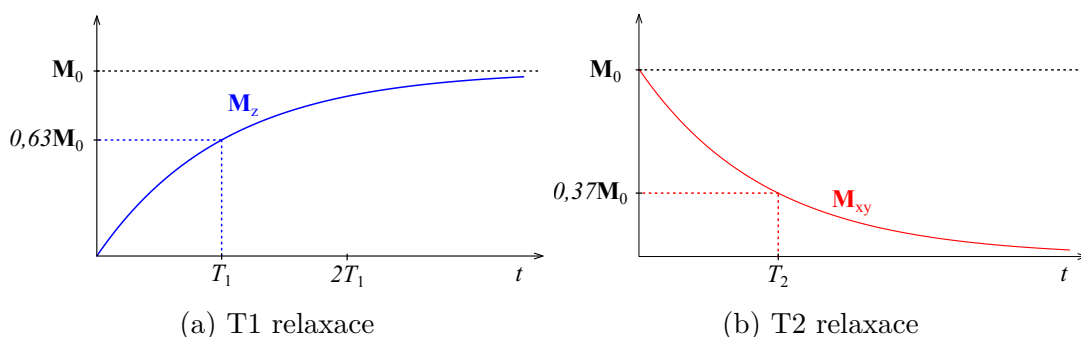
Obr. 2.7: Vektor magnetizace \vec{M} rozložený na podélnou \vec{M}_z a příčnou \vec{M}_{xy} složku.

kde $\mathbf{M}_0 = \frac{N}{V} \frac{\mu^2 \mathbf{B}_0}{3kT}$ je velikost podélné magnetizace za ustáleného stavu a čas T_1 se označuje jako T_1 relaxační čas (nebo také čas podélné relaxace, spin-mřížka nebo spin-lattice relaxace) [44]. Za tento čas se obnoví 63 % původní velikosti podélné magnetizace.

Vektor příčné magnetizace \vec{M}_{xy} rotuje v rovině xy s rezonanční frekvencí jader ν , jeho velikost se ovšem s časem t snižuje:

$$\vec{M}_{xy} = \mathbf{M}_0 e^{i2\pi\nu t} e^{-t/T_2}. \quad (2.9)$$

Za čas T_2 se příčná složka magnetizace sniží na 37 % původní hodnoty, tento čas je označován jako T_2 relaxační čas nebo čas příčné relaxace (spin-spin relaxace). Oba relaxační časy ilustruje obrázek 2.8.



Obr. 2.8: Relaxace způsobuje pokles velikosti b) příčné složky magnetizace \vec{M}_{xy} na úkor a) podélné složky \vec{M}_z , která se postupně navrácí do původního stavu.

V reálných podmínkách magnetické pole \vec{B}_0 není zcela homogenní a proto magnetizace v rovině xy ubývá rychleji, než předpovídá rovnice (2.9). Vektory příčné magnetizace jednotlivých jader totiž vlivem mírně odlišné indukce vnějšího magnetického pole rotují s různou rezonanční frekvencí a tak dojde brzy po excitaci k rozfázování a FID je tlumen rychleji. Časová konstanta, která bere v úvahu uvedené nedostatky, se běžně označuje T_2^* .

Relaxační časy kapalných látek jsou obvykle v řádu sekund, v případě pevných látek může čas T_1 dosahovat hodiny, kdežto čas T_2 je velmi malý (v řádu mikrosekund). Měřením T_1 a T_2 relaxačních časů vody v živé tkáni lze např. rozlišit zdravou tkáň od tkáně napadené rakovinou [44].

2.2.2 RF pulzy

Nyní se zaměříme na důležitou fázi snímání dat, a sice vychýlení vektoru magnetizace z rovnovážného stavu do roviny xy . Toho není možné dosáhnout jen pomocí statických magnetických polí, protože by bylo nutné náhle vypnout magnetické pole

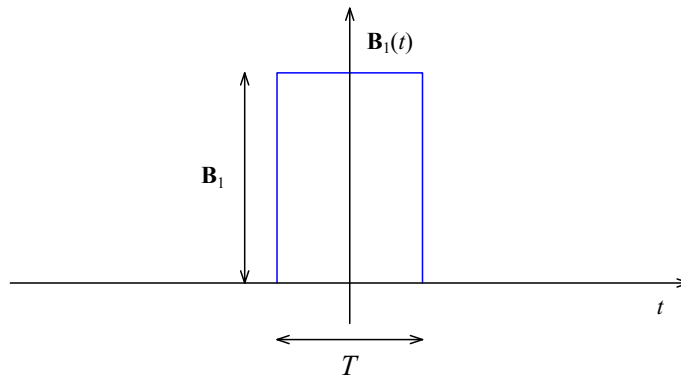
ve směru osy z a nahradit ho polem v ose x . Supervodivý magnet tvořící pole \vec{B}_0 ale jen tak vypnout nelze a proto je nutné přijít s jinou strategií.

Klíčem je rezonance – aplikováním velmi malého magnetického pole podél osy x oscilujícího blízko Larmorovy frekvence jader je možné vektor magnetizace \vec{M} postupně vychýlit z osy z i za přítomnosti velmi silného pole \vec{B}_0 . Takovému poli se pak říká radiofrekvenční (RF), protože rezonanční frekvence jader se nachází v rádiovém spektru.

V praxi potom potřebujeme, aby takové magnetické pole vychýlilo magnetizaci o přesně daný úhel, nejčastěji o 90° resp. 180° . Každý RF pulz je úzkopásmový signál modulovaný nějakou obálkou, nejčastěji obdélníkovou (pulzy RECT) nebo ve tvaru funkce sinc (pulzy SINC). Obálka RF pulzu pak určuje velikost magnetické indukce \mathbf{B}_1 a šířku pulzu T . Výsledný pulz má šířku pásma Δf , součin $T\Delta f$ je pak označován jako *selektivita pulzu* [2]. Kombinace těchto parametrů určuje *úhel vychýlení* Θ .

V případě obdélníkového pulzu ($\mathbf{B}_1(t) = \mathbf{B}_1$ pro $0 < t < T$, obr. 2.9) je úhel vychýlení Θ přímo úměrný amplitudě \mathbf{B}_1 a šířce pulzu T :

$$\Theta = \gamma \mathbf{B}_1 T. \quad (2.10)$$



Obr. 2.9: Obdélníkový radiofrekvenční pulz.

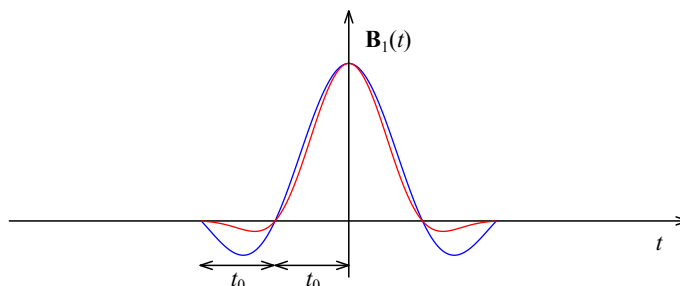
Použití obdélníkového pulzu je však omezené – nespojitost obálky klade vysoké nároky na radiofrekvenční zesilovače a obdélníkový průběh způsobuje malou spektrální selektivitu.

Oproti tomu pulzy SINC (obr. 2.10) jsou ve spektru ostře lokalizované – ideální nekonečný pulz by měl obdélníkové spektrum, reálný pulz je ovšem časově omezený. Obálka těchto pulzů je dána vztahem:

$$\mathbf{B}_1(t) = \begin{cases} A \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi t}{t_0}\right), & -N_L t_0 \leq t \leq N_R t_0, \\ 0, & \text{jinak,} \end{cases} \quad (2.11)$$

kde A je špičková amplituda RF pulzu v čase $t = 0$, t_0 je polovina šířky centrálního laloku a N_L resp. N_R jsou počty nulových bodů vlevo resp. vpravo od centrálního

laloku. Šířka pásma takového pulzu je přibližně $\Delta f \approx \frac{1}{t_0}$ a selektivita $T\Delta f = N_L + N_R$. Vzhledem k tomu, že jsou N_L a N_R v praxi konečná čísla (1–4), má pulz nespojitou první derivaci a proto bývá SINC pulz ještě dodatečně váhován nějakým oknem (např. Hammingovým nebo Hannovým).



Obr. 2.10: SINC radiofrekvenční pulz bez váhování (modře) a s váhováním Hammingovým oknem (červeně).

Radiofrekvenční pulzy však neslouží pouze k počáteční excitaci, jak uvidíme později. Můžeme se setkat s pulzy, které vybírají prostorovou oblast zájmu, s pulzy „zaostřujícími“ signál a dalšími typy.

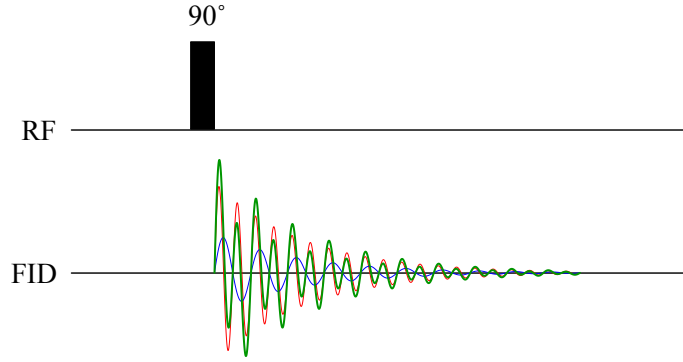
2.3 Základní zobrazovací techniky

V této kapitole bude představeno několik základních způsobů získávání dat pomocí nukleární magnetické rezonance. Kompletní výčet by obsáhl samostatnou publikaci, proto se zde omezíme pouze na ty techniky, které jsou podstatné pro tuto práci.

2.3.1 NMR spektroskopie

NMR spektroskopie (NMR Spectroscopy), někdy také nazývaná Spektroskopie nukleární magnetické rezonance, byla první používanou technikou, neboť ve své původní formě (CW spektroskopie, viz kapitola 2.2) nevyžadovala žádné výpočetní prostředky. Cílem měření je získat informaci o složení celého měřeného vzorku ve formě spektra.

Nejjednodušší měřicí sekvence je uvedena na obr. 2.11. Obsahuje jeden 90° RF pulz bezprostředně následovaný vzorkováním FID. Před aplikováním RF pulzu je nutné vyčkat určitý čas na obnovení magnetizace v ose z , jinak by vektor magnetizace nebyl přesně do roviny xy . Před započítím měření je také nutné zkalibrovat RF pulz nastavením šířky pulzu tak, aby otáčel vektor magnetizace přesně o 90° . To je možné provést opakovaným měřením stejného vzorku a postupnou změnou šířky pulzu – jakmile dosáhneme maximální velikosti odezvy, pulz je nastaven přesně [33].

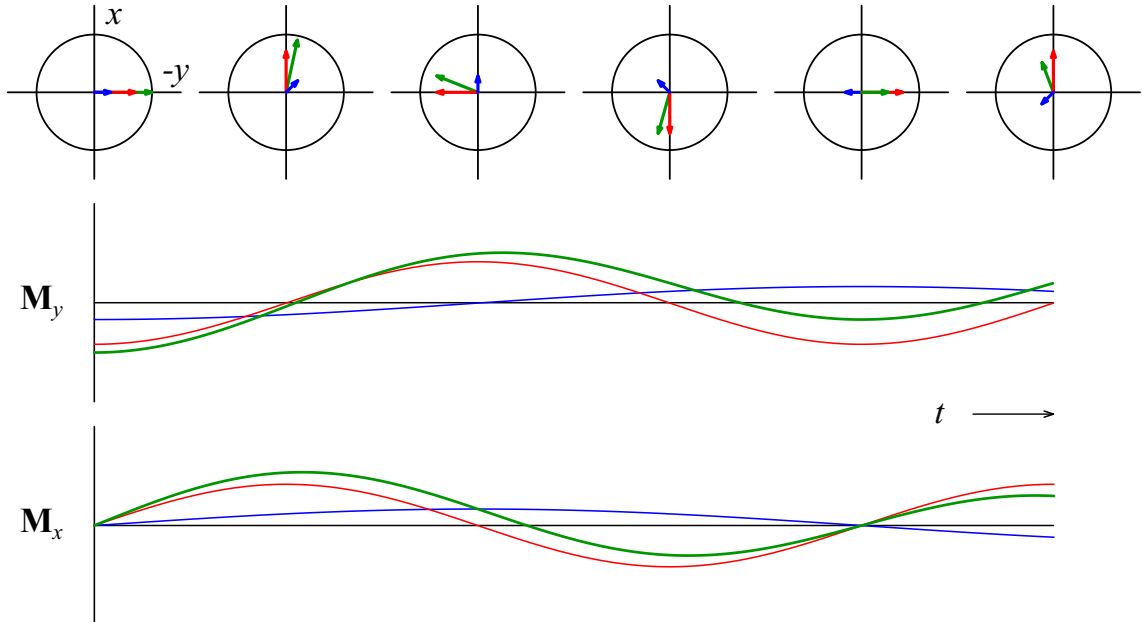


Obr. 2.11: Nejjednodušší sekvence – 90° RF pulz následován vzorkováním.

Průběh rotace vektoru magnetizace v rovině xy ilustruje obr. 2.12. Po excitaci začíná vektor \vec{M}_{xy} orientován ve směru osy $-y$ a dále jsou jeho směr a velikost určeny vektorovým součtem vektorů magnetizace všech excitovaných jader. Zde „modrá“ skupina jader rezonuje na frekvenci ν_b , „červená“ jádra pak na frekvenci $\nu_r = 2\nu_b$, celková magnetizace v osách x a y je pak dána:

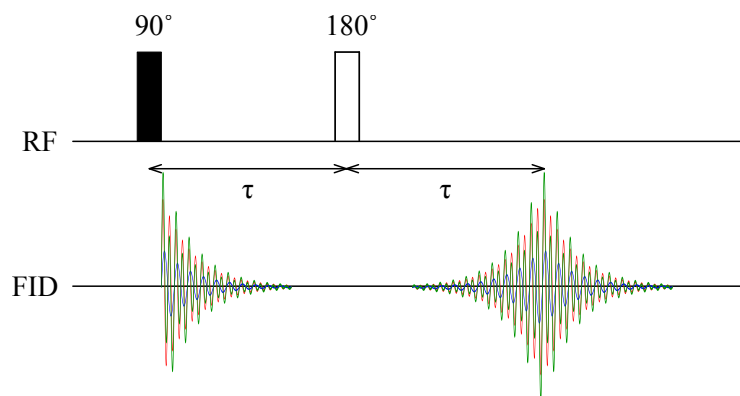
$$\begin{aligned} \mathbf{M}_y &= -\mathbf{M}_b \cos(2\pi\nu_b t) - \mathbf{M}_r \cos(2\pi\nu_r t), \\ \mathbf{M}_x &= \mathbf{M}_b \sin(2\pi\nu_b t) + \mathbf{M}_r \sin(2\pi\nu_r t), \end{aligned} \quad (2.12)$$

kde $\mathbf{M}_b = \frac{N_b}{V}\boldsymbol{\mu}$ resp. $\mathbf{M}_r = \frac{N_r}{V}\boldsymbol{\mu}$ jsou počáteční velikosti magnetizace jednotlivých skupin jader [33].



Obr. 2.12: Rotace vektoru magnetizace v rovině xy – modře a červeně jsou vyznačeny dvě skupiny jader o různé rezonanční frekvenci, zeleně pak celková magnetizace \vec{M}_{xy} .

Důmyslnější měřicí sekvencí je *spin echo* (obr. 2.13). Přidáním druhého RF pulzu, tentokrát 180° , v čase τ jsou zrcadlově převráceny vektory magnetizace ve směru osy y , jejich směr pohybu však zůstává stejný a proto vzniká ozvěna v čase 2τ .



Obr. 2.13: Spin echo pomocí 180° v čase τ převrátí vektory magnetizace ve směru osy y a tím vytvoří ozvěnu v čase 2τ .

Tato metoda patří mezi nejvíce využívané sekvence a je také součástí mnoha složitějších sekvencí. Její výhoda spočívá v potlačení vlivu nehomogenit magnetického pole \vec{B}_0 . Po excitaci 90° RF pulzem dochází k rozfázování vektorů magnetizace právě vlivem nehomogenit, obrácením fáze vektorů \vec{M}_{xy} dojde k opětovnému sfázování (zaostření) a v čase 2τ opět vektory magnetizace směřují ve směru osy y .

Po navzorkování FID je nutné data zpracovat, metodami zpracování signálů v nukleární magnetické rezonanci se bude zabývat kapitola 3.

Interpretace spekter

Při interpretaci spekter je v první fázi vždy nutné identifikovat spektrální čáry a přiřadit jim hodnotu chemického posunu vzhledem k referenční látce. Jednotlivé spektrální čáry mohou patřit buď zkoumaným sloučeninám nebo rozpouštědлу. V případě ^1H spektroskopie se pak můžeme setkat s tzv. *saletelitními* čarami způsobenými interakcemi s jádrem uhlíku ^{13}C – vzhledem k jeho velmi nízkému přírodnímu výskytu mají tyto satelity nízkou intenzitu.

Při kvantitativní analýze vycházíme z tzv. *integrální intenzity* signálů. Kvůli multiplicitě signálů a vlivu relaxačních časů bychom prostým odečtem intenzity jednotlivých spektrálních čar nezískali správnou představu o množství odpovídajících jader ve vzorku. Proto je výhodnější spočítat integrál (sumu) části spektra odpovídající jednomu atomu (nebo skupině atomů) a podle hodnoty tohoto integrálu určit odpovídající množství. Automatizovanými metodami kvantifikace spekter se bude zabývat kapitola 3.3.

2.3.2 In vivo NMR spektroskopie

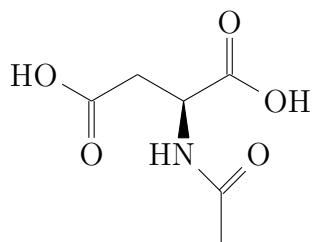
Speciálním případem NMR spektroskopie je tzv. *In vivo NMR spektroskopie*, anglicky označovaná jako In vivo Magnetic Resonance Spectroscopy nebo jen Magnetic Resonance Spectroscopy (MRS). Předpona *in vivo* v názvu značí, že se jedná o diagnostickou metodu prováděnou na živých organismech. Velmi často je pomocí MRS zjišťována přítomnost a množství metabolitů v mozku.

Měření NMR spekter některých izotopů, zejména ^1H , ^{13}C a ^{31}P , je velmi cenným zdrojem informací o řadě biochemických a metabolických procesech v lidském mozku. V současné době je z hlediska klinické praxe nejvýznamnější ^1H in vivo spektroskopie, neboť izotop ^1H má téměř 100% výskyt v přírodě a jeho signál je proto velmi intenzivní.

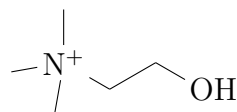
Vybrané metabolity

Následující výčet obsahuje nejdůležitější metabolity pozorované ve MR spektrech (jejich strukturní vzorce jsou na obr. 2.14, výskyt v MR spektru pak na obr. 2.15):

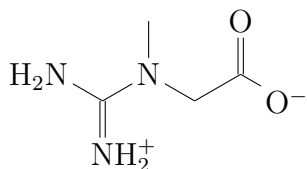
- N-acetylaspartát (NAA) – druhý nejčastěji se vyskytující metabolit v mozku, slouží mimo jiné k syntéze lipidů či regulaci syntézy proteinů. Jeho zvýšená hladina může znamenat neuronální dysfunkci [48].
- Cholin (Cho) – pravděpodobně nejvýznamnější signál v MRS mozku, indikuje porušování buněčných membrán, koncentrace se zvyšuje při nádorových onemocněních [48].
- Kreatin (Cr) – jeho hladina bývá stabilní i za patologických změn, proto bývá používán jako referenční signál v MRS. Snížení hladiny může nastat vlivem nádorů nebo mrtvice, zvýšení pak s rostoucím věkem [38].
- Fosfokreatin (PCr) – důležitý při tvorbě adenosin trifosfátu (ATP).
- Laktát (Lac) – za klidových podmínek je jeho hladina velmi nízká, zvyšuje se při anaerobním metabolismu – např. při mozkové mrtvici.
- Myo-inositol (mI) – cukr podílející se na procesu osmózy, koncentrace roste při přítomnosti gliových nádorů nebo při Alzheimerově chorobě.
- Glutamát (Glu) – nejhojnější neurotransmitter v mozku, při přenosu nervového vzruchu je v jenom ze sousedních neuronů glutamát uvolněn a v druhém neuronu detekován nějakým receptorem.
- Glutamin (Gln) – neesenciální aminokyselina, tvorbou glutaminu se odstraňuje amoniak z mozkové tkáně (při zvýšené hladině amoniaku dochází k vyčerpání glutamátu).
- Glukóza (Glc) – krevní cukr nezbytný pro fungování organismu, jedná se o nejrychlejší zdroj energie (pro mozkovou tkáň dokonce jediný zdroj energie).



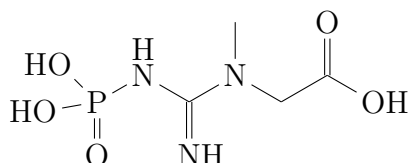
(a) N-acetylaspartát (NAA)



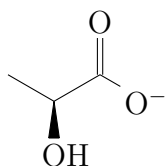
(b) Cholin (Cho)



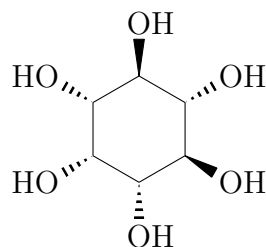
(c) Kreatin (Cr)



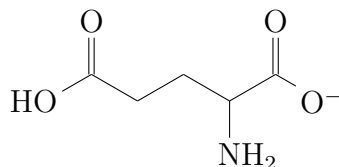
(d) Fosfokreatin (PCr)



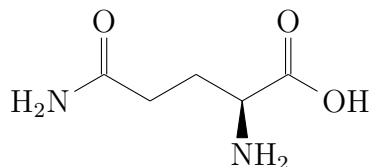
(e) Laktát (Lac)



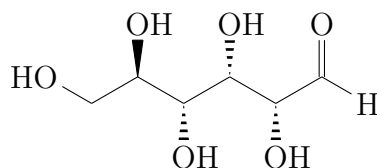
(f) Myo-inositol (mI)



(g) Glutamát (Glu)



(h) Glutamin (Gln)

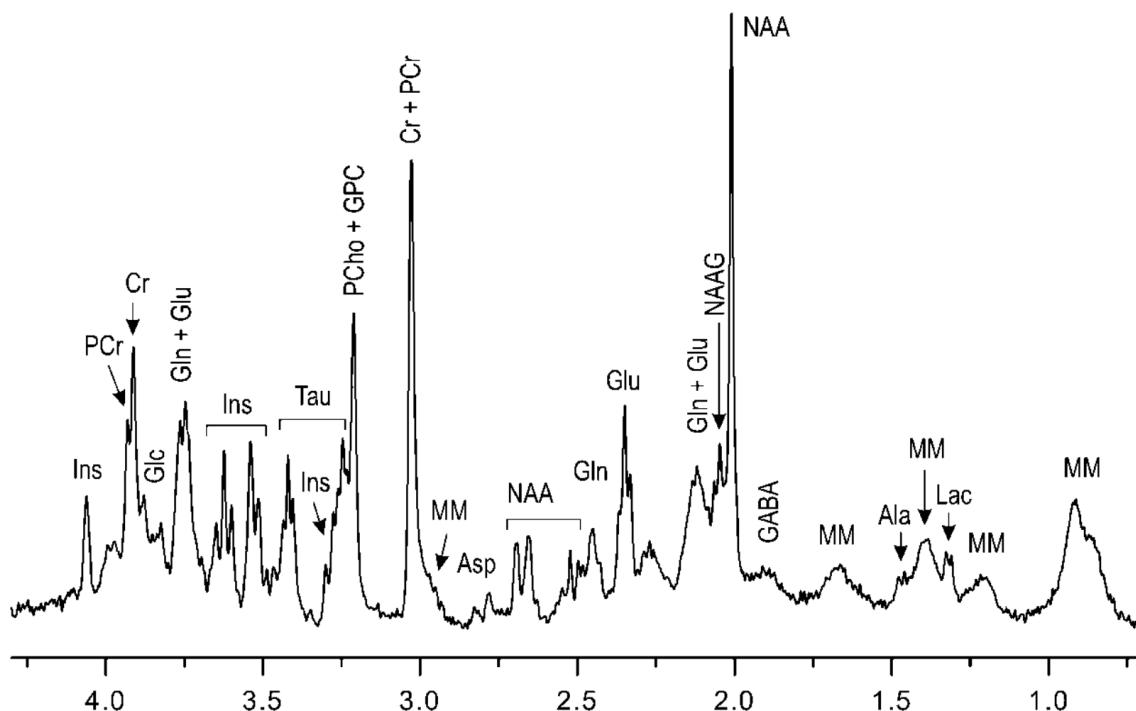


(i) Glukóza (Glc)

Obr. 2.14: Strukturní vzorce vybraných metabolitů.

Interpretace spekter

Při interpretaci in vivo spekter je snahou určit relativní poměry mezi intenzitami signálů jednotlivých metabolitů. Absolutní kvantifikace zde nemá smysl, neboť měření je ovlivněno mnoha parametry, jejichž vliv ani nemusí být zcela známý [48].



Obr. 2.15: In Vivo ^1H spektrum části mozku krysy [52].

2.3.3 Magnetická rezonance

Pod poněkud matoucím názvem *Magnetická rezonance*, anglicky Magnetic Resonance Imaging (MRI), se ukrývá nejčastěji používaná zobrazovací technika používaná v medicíně. Rozvoj této techniky umožnil až nástup výpočetní techniky, neboť ke zpracování naměřených dat je nutné provádět diskrétní 2D Fourierovu transformaci. MRI umožňuje získat řezy libovolnou částí těla, tyto řezy je pak možné dále zpracovat a vytvořit např. 3D obraz.

Zakódování prostorové informace

Dosud jsme uvažovali pouze statické magnetické pole \vec{B}_1 v ose z a dynamické pole \vec{B}_1 v rovině xy . Aby bylo možné získat informaci o prostorovém rozložení zkoumaných jader, je nutné přidat další magnetická pole, nyní však tzv. *gradientní*, ve všech osách (\vec{G}_x , \vec{G}_y , \vec{G}_z). Gradientní pole způsobí, že celková indukce magnetického pole v různých bodech zkoumaného vzorku (pacienta) nebude stejná a tedy i rezonanční frekvence se bude lišit podle polohy.

Nejjednodušším způsobem zakódování prostorové informace je *výběr vrstvy* (slice selection). Aplikováním gradientního pole \vec{G}_z během RF pulzů jsou vybudena pouze jádra v určité vrstvě. Tloušťka a poloha této vrstvy závisí na šířce pásma RF pulzů.

Rezonanční frekvence nyní závisí na poloze r_z vzhledem k tzv. *izocentru* gradi-

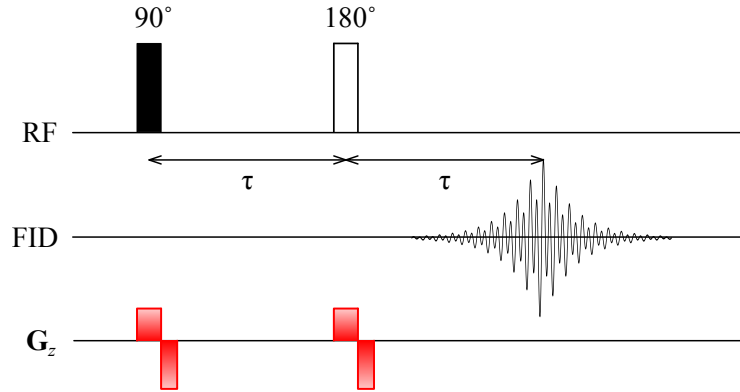
entu, což bývá obvykle střed magnetu, a je dána:

$$\nu(r_z) = \frac{\gamma}{2\pi} (\mathbf{B}_0 + \mathbf{G}_z r_z), \quad (2.13)$$

kde $\mathbf{G}_z [T \cdot m^{-1}]$ je velikost gradientu ve směru osy z . Tloušťka vrstvy je pak:

$$\Delta z = \frac{2\pi \Delta f}{\gamma \mathbf{G}_z}, \quad (2.14)$$

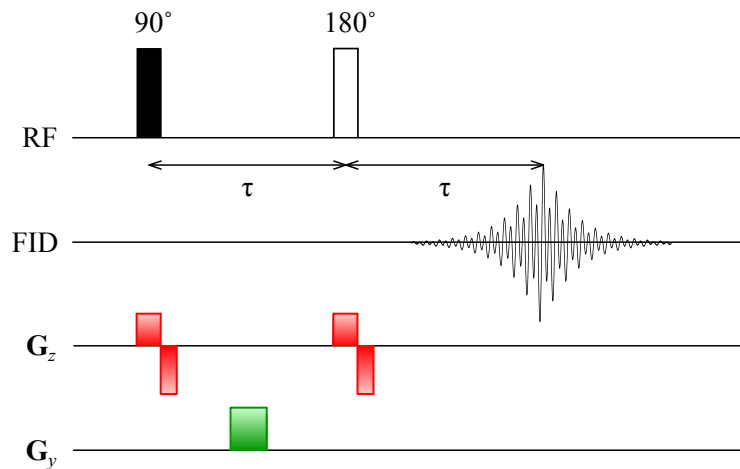
kde Δf je šířka pásma RF pulzu [2].



Obr. 2.16: Aplikováním gradientního pole \vec{G}_z během RF pulzů jsou vybudena pouze jádra v určité vrstvě.

Z obr. 2.16 je patrné, že gradientní pole \vec{G}_z je během RF pulzu zapnuto v „kladném“ směru a ihned po RF pulzu následuje korekční gradient v opačném směru. Během excitace gradientní pole \vec{G}_z způsobí, že jádra s různou polohou r_z budou rotovat různě rychle a tím dojde k rozfázování. Korekční gradient tento fázový rozdíl napraví.

Druhým krokem k získání prostorové informace je *fázové zakódování* (phase encoding), příklad měřicí sekvence je zobrazen na obr. 2.17.



Obr. 2.17: Gradient \vec{G}_z slouží k fázovému zakódování prostorové informace.

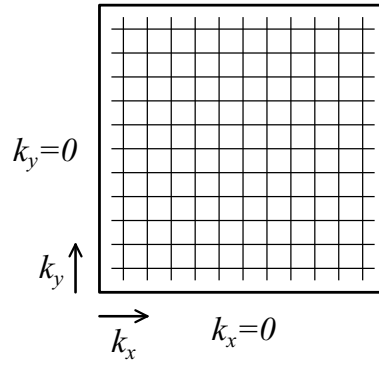
Gradientní pole \vec{G}_y rozfázuje vektory magnetizace \vec{M}_{xy} v závislosti na poloze r_y . Okamžitá rezonanční frekvence během působení gradientního pole \vec{G}_y ve vzdálenosti r_y od izocentra ve směru osy y je:

$$\nu(r_y) = \frac{\gamma}{2\pi} \mathbf{G}_y r_y. \quad (2.15)$$

Fázový rozdíl se během působení gradientu akumuluje a celková získaná fáze na konci pulzu je:

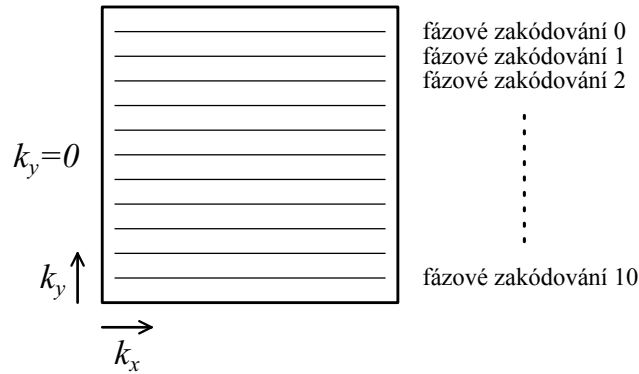
$$\phi(r_y) = r_y \gamma \int_0^T \mathbf{G}_y(t) dt = 2\pi k_y r_y, \quad (2.16)$$

kde T je šířka gradientního pulzu a k_y je poloha v tzv. *k-prostoru* [2]. *k*-prostor (*k*-space) je pojmenování pro oblast prostorových frekvencí (obr. 2.18), většinou je dvourozměrná, ale může mít až 3 rozměry (pokud započítáme i čas, pak dokonce 4 rozměry). Při pochopení měřicích sekvencí MRI je klíčové uvědomit si, jakou trajektorii sekvence během měření vykonává právě v *k*-prostoru.



Obr. 2.18: *k*-prostor, neboli oblast prostorových frekvencí obrazu MRI [2].

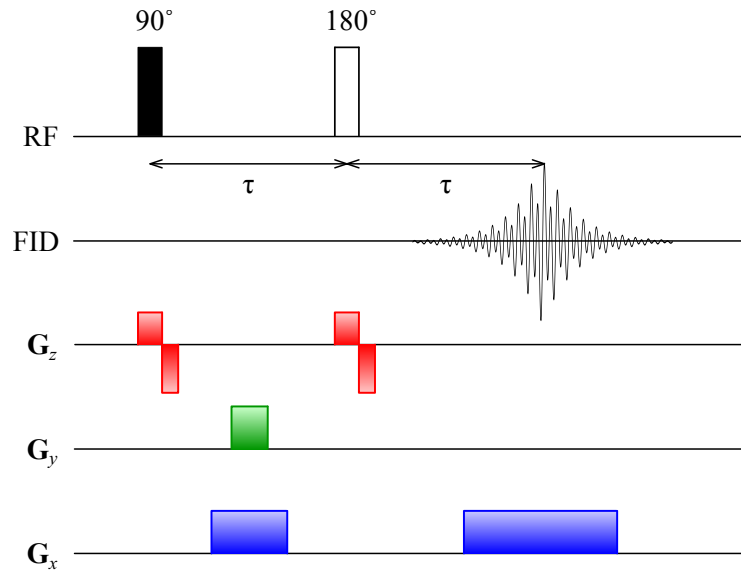
Změnou amplitudy fázového gradientu a opakovaným měřením naplníme *k*-prostor (nyní pouze jednorozměrný, viz obr. 2.19) hodnotami.



Obr. 2.19: Fázovým zakódováním naplníme řádky *k*-prostoru (nyní je *k*-prostor pouze jednorozměrný, takže řádek je vlastně jedna hodnota) [2].

Volbou počtu a rozestupu mezi vzorky k_y ovlivňujeme oblast snímání a rozlišení výsledného obrazu. Pokud zvolíme příliš málo bodů v k -prostoru, dojde k aliasingu a konvenční metody rekonstrukce vytvoří v obraze artefakty. Zvyšování rozlišení ale prodlužuje dobu měření.

Posledním krokem prostorového zakódování je *frekvenční zakódování* (frequency encoding). Gradientní magnetické pole \vec{G}_x je aktivní během vzorkování FID (viz obr. 2.20) a ovlivňuje tak rezonanční frekvenci v závislosti na vzdálenosti r_x od izocentra ve směru osy x . Gradient magnetického pole opět způsobuje rozdílnou akumulaci fáze podle polohy r_x a proto je nutné nejprve provést „předfázování“ (prephasing) samostatným pulzem (u spin echo sekvence nejčastěji mezi RF pulzy nebo před vyčítacím pulzem, ale s opačnou orientací) [2].



Obr. 2.20: Frekvenční zakódování sestává z předfázovacího a vyčítacího gradientu.

Rezonanční frekvence během působení frekvenčního gradientu pak bude:

$$\nu(r_x, t) = \frac{\gamma}{2\pi} (\mathbf{B}_0 + \mathbf{G}_z(t)r_x) \quad (2.17)$$

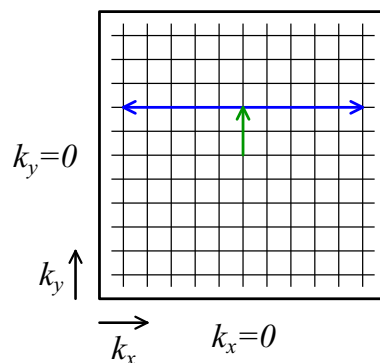
a fáze akumulovaná během této doby je:

$$\phi(r_x, t) = \int_0^T 2\pi\nu(r_x) dt = 2\pi r_x k_x(t). \quad (2.18)$$

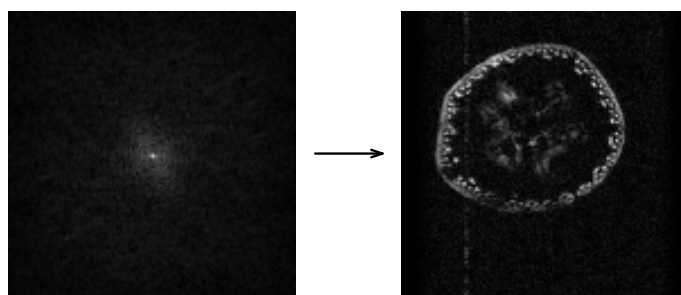
Trajektorii v k -prostoru, podél které měření probíhá, je možné vidět na obr. 2.21.

Dosud uvažované sekvence respektovaly kartézskou soustavu souřadnic. To však není jediný způsob sběru dat v k -prostoru – existují sekvence vzorkující data podél radiálních čar nebo podél spirály v k -prostoru [35].

Ukázku obrazu z MRI je možné vidět na obr. 2.22. Měření probíhalo na Ústavu přístrojové techniky Akademie věd České republiky, kde se nachází experimentální nukleární magnetická rezonance se supravodivým magnetem o indukci 4,7 T.



Obr. 2.21: Trajektorie v k -prostoru – fázovým gradientem dojde k posunu ve směru k_y , frekvenčním gradientem pak vyčteme celý řádek k -prostoru.



Obr. 2.22: Reprezentace obrazu banánu v k -prostoru (po gamma korekci, $\gamma = 0.5$) a v prostorové oblasti.

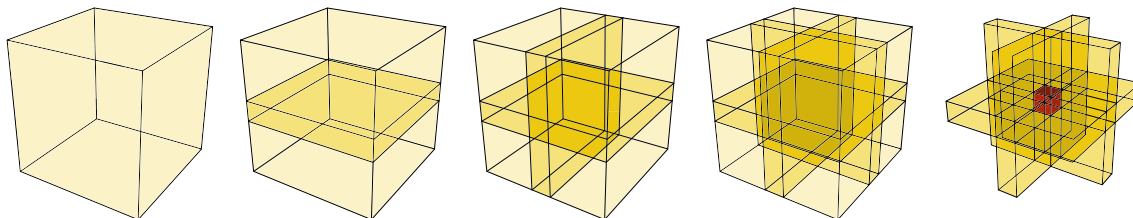
2.3.4 Magnetické rezonanční spektroskopické zobrazování

Magnetické rezonanční spektroskopické zobrazování – anglicky Magnetic Resonance Spectroscopy Imaging (MRSI) – kombinuje spektroskopické a zobrazovací metody za účelem získání prostorově lokalizovaných spekter. Výsledkem je potom dvourozměrná nebo třírozměrná mřížka tzv. *voxelů* (prostorových pixelů), z nichž každý je reprezentován nikoli jedinou hodnotou (jasu), ale celým spektrem. Prostorové rozlišení takového obrazu bývá poměrně nízké, vyššímu rozlišení totiž brání nízký poměr signálu k šumu (SNR). Každý voxel však obsahuje informaci o složení vzorku v daném místě. Existují dvě základní techniky, jak takové obrazy měřit – *jednovoxelová spektroskopie* a *spektroskopické zobrazování*.

Jednovoxelová spektroskopie

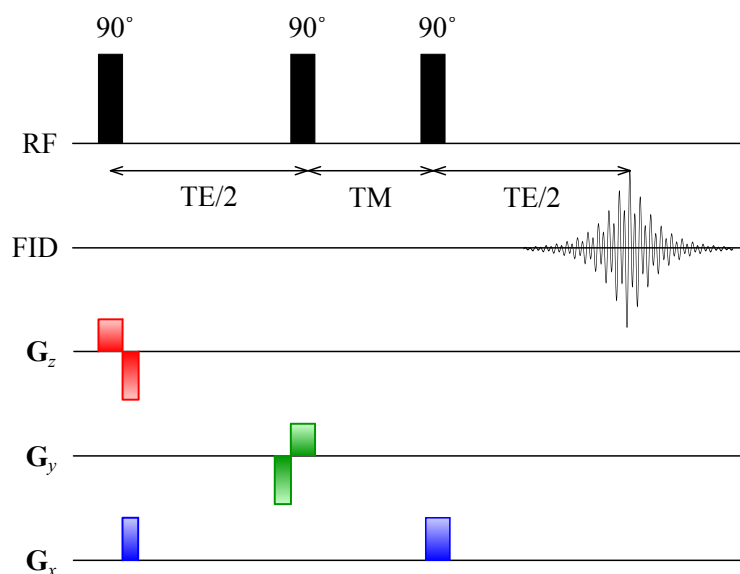
Jednovoxelová spektroskopie – anglicky Single Voxel Spectroscopy (SVS) – je jednodušší metodou zobrazování MRSI. Princip spočívá ve výběru oblasti zájmu VOI (Volume of Interest) třemi selektivními RF pulzy za přítomnosti příslušných gradientů magnetického pole. Tímto je dosaženo excitace pouze omezené prostorové

oblasti (viz obr. 2.23) a následná odezva odpovídá jednomu voxelu. Jednovoxelové techniky jsou poměrně jednoduché, avšak kvůli své neefektivitě a možným nežádoucím účinkům na pacienty nejsou příliš výhodné. Vzhledem k omezením při konstrukci RF pulzů (viz kapitola 2.2.2) nelze dosáhnout pravoúhlého profilu voxelů, což také brání v přesné lokalizaci potenciálně patologicky změněných oblastí [48].



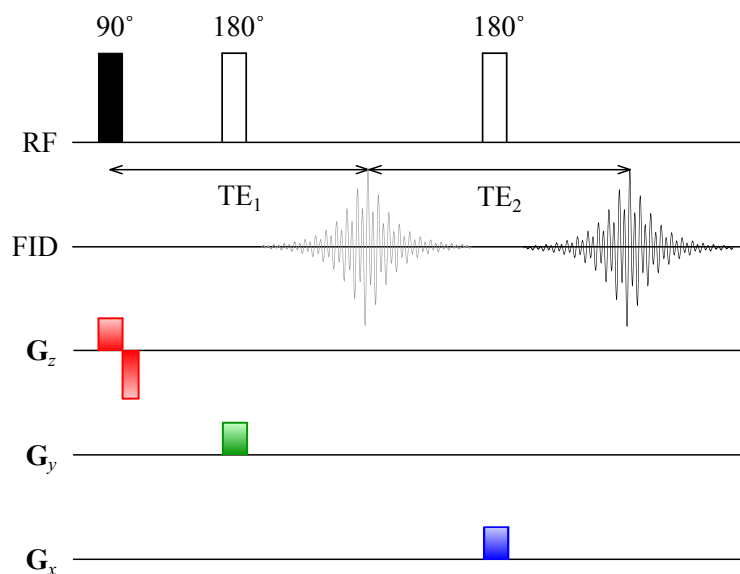
Obr. 2.23: Proces výběru voxelu v jednovoxelové spektroskopii.

Pro výběr voxelu můžeme volit ze dvou základních sekvencí – STEAM (STimulated Echo Acquisition Mode) a PRESS (Point-RESolved Spectroscopy). Sekvence STEAM (obr. 2.24) sestává ze tří 90° RF pulzů, které postupně natočí vektory magnetizace do roviny xy , následně xz a nakonec opět do roviny xy . STEAM je vhodné pro měření metabolitů s krátkými relaxačními časy T_2 nebo multiplety (NAA, Cho, Cr, PCr, mI, Glu, Gln), neboť umožňuje měření při velmi krátkých echo časech [48].



Obr. 2.24: Jednovoxelová metoda STEAM (Stimulated Echo Acquisition Mode).

Sekvence PRESS (obr. 2.25) vychází ze spin echa, obsahuje tedy jeden 90° excitační RF pulz následovaný dvěma 180° pulzy. Amplituda indukovaného spin echa je dvakrát větší než v případě stimulovaného echa u metody STEAM. Proto tato technika nabízí lepší poměr signálu k šumu. Selektivní 180° pulzy jsou však při stejné šířce pásma a excitačním profilu výkonově až desetkrát náročnější [48].



Obr. 2.25: Jednovoxelová metoda PRESS (Point-RESolved Spectroscopy).

Spektroskopické zobrazování

Oproti jednovoxelové spektroskopii je v případě *Spektroskopického zobrazování* – anglicky Spectroscopic Imaging (SI) nebo Chemical Shift Imaging (CSI) – prostorové zakódování informace řešeno podobným způsobem jako v MRI. Každé měření tedy obsahuje informaci o všech voxelech (v dané vrstvě nebo v případě 3D měření v celém vzorku) a poměr signálu k šumu je srovnatelný s jednovoxelovým měřením se stejnou velikostí voxelu. Využít lze obou měřicích sekvencí představených výše – STEAM i PRESS. Mezi první dva RF pulzy je pouze přidán gradientní pulz ve dvou resp. třech osách (při 2D resp. 3D snímání).

Data získaná spektroskopickým zobrazováním jsou velmi významná v klinické praxi, neboť změny ve výskytu metabolitů často předchází významné strukturní změny, což přispívá k časnější diagnostice. Hlavní překážkou nasazení MRSI v diagnostice je ovšem velká časová náročnost měření – při rozlišení $24 \times 24 \times 12$ dosahuje doba měření až jedné hodiny [48].

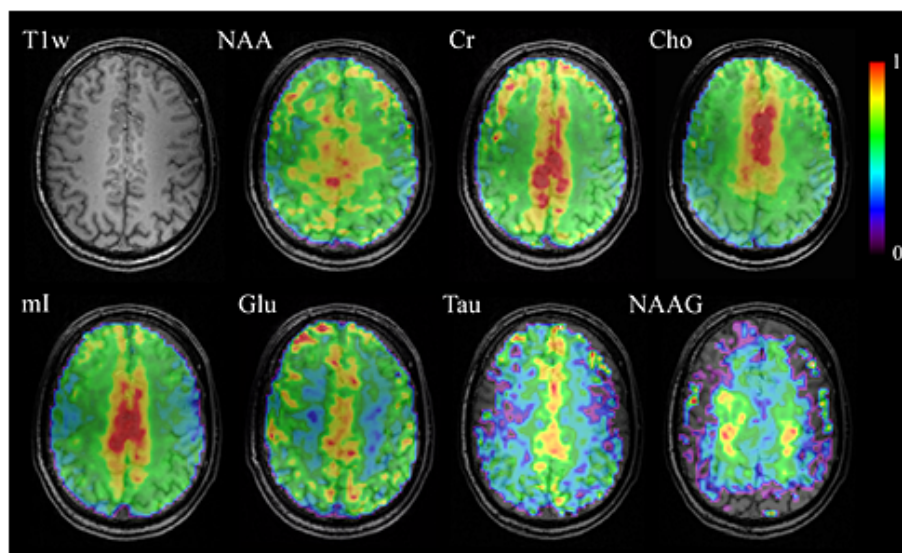
Oproti jednovoxelové spektroskopii je každým měřením vybudena velká část mozku pacienta včetně okrajových částí obsahujících velké množství vody a tuku. Tyto signály jsou velmi silné a jejich snímání je nežádoucí, proto je nutné při použití SI tyto signály potlačit. K tomu slouží speciální sekvence předcházející samotné měření (viz kapitola 2.4.3).

Interpretace a prezentace dat

Výsledkem MRSI měření je velké množství spekter (pro rozlišení $24 \times 24 \times 12$ voxelů se jedná o 6912 spekter), které již není možné interpretovat ručně. Automatické

metody tedy musí spolehlivě určit poměry intenzit jednotlivých metabolitů.

Možností zobrazení naměřených dat je více, je možné zobrazit zmenšená spektra do mřížky voxelů, lepším způsobem je však vykreslit mapy výskytů všech metabolitů zvlášť (viz obr. 2.26). Pro lepší představu, kde se metabolity vyskytují, jsou obvykle tyto mapy vykresleny přes detailní MRI obraz mozku.



Obr. 2.26: Mapy metabolitů vykreslené na detailním MRI obrazu mozku [3].

2.4 Typické problémy a jejich řešení

Při měření nukleární magnetickou rezonancí se setkáváme s mnoha problémy na všech úrovních – při měření i při zpracování získaných dat. Tato kapitola stručně uvede některé z nich společně s obvyklým postupem pro jejich eliminaci.

2.4.1 Nehomogenita magnetického pole

Signál z nukleární magnetické rezonance vzniká díky rezonanci jader s magnetickým momentem. Pokud magnetické pole \vec{B}_0 není dostatečně homogenní, liší se rezonanční frekvence jader podle jejich polohy. Po excitaci pak dojde rychle k rozfázování a indukovaná odezva rychle klesá, výsledkem je nižší poměr signálu k šumu.

Před započítím měření je tedy nutné vyrovnat nehomogenity magnetického pole, k tomu slouží řada malých elektromagnetů umístěných okolo měřeného vzorku. Tyto elektromagnety vytvářejí magnetická pole různých gradientů (viz tabulka 2.4). Procesu nastavení těchto cívek se říká *shimování* (shimming) a jedná se o velmi zdlouhavou proceduru.

Tab. 2.4: Přehled typických shimovacích cívek.

označení cívky	rovnice odpovídajícího pole
Z0	1
Z1	z
Z2	$2z^2 - (x^2 + y^2)$
Z3	$z [2z^2 - 3(x^2 + y^2)]$
Z4	$8z^2 [z^2 - 3(x^2 + y^2)] + 3(x^2 + y^2)^2$
Z5	$48z^3 [z^2 - 5(x^2 + y^2)] + 90z(x^2 + y^2)^2$
X	x
Y	y
ZX	zx
ZY	zy
X2-Y2	$x^2 - y^2$
XY	xy
Z2X	$x [4z^2 - (x^2 + y^2)]$
Z2Y	$y [4z^2 - (x^2 + y^2)]$
ZXY	zxy
Z(X2-Y2)	$z(x^2 - y^2)$
X3	$x(x^2 - 3y^2)$
Y3	$y(3x^2 - y^2)$

Nehomogenity magnetického pole způsobuje kromě výrobních nepřesností samotného magnetu také přítomnost kovových předmětů v okolí magnetu (železobetonová konstrukce budovy, rám dveří apod.) a struktura měřeného vzorku. S rostoucí indukcí magnetického pole \mathbf{B}_0 roste i přesnost, s jakou musí být toto pole shimováno. Chemický posun totiž nezávisí na velikosti této indukce. V některých případech je možné využít rotace vzorku k vyrování nehomogenit v rovině xy , stále je však nutné korigovat nehomogenity ve směru osy z .

2.4.2 Decoupling

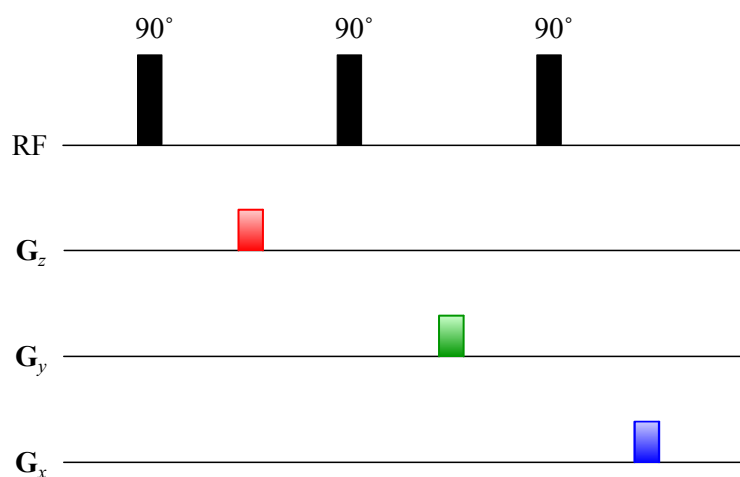
Multiplicita signálů vysvětlená v kapitole 2.1.7 nám pomáhá rozpoznat strukturu molekul ve vzorku obsažených. Zároveň však nepříznivě ovlivňuje poměr signálu k šumu. Aby bylo možné interpretovat složitější spektra, zejména ^{13}C , je nutné tento jev potlačit. K tomu slouží speciální metoda nazývaná *decoupling*.

Rozšířením měřicí sekvence o saturační pulzy je potlačena interakce mezi atomy a vícenásobné spektrální čáry jsou sloučeny do jediné s výrazně vyšší intenzitou. Saturační pulzy mohou být buď selektivní nebo širokopásmové. Selektivní decoupling potlačuje vliv jen vybraných skupin ekvivalentních atomů, zatímco širokopásmový

decoupling působí na celé spektrum. Pokud ozařujeme jádra stejného typu jako pozorujeme, jedná se o homonukleární decoupling, v opačném případě pak heteronukleární decoupling.

2.4.3 Potlačení signálu vody a tuku

Při zkoumání biologických vzorků je nutné počítat s všudypřítomnou vodou a často i tukem. Signály vody a tuku bývají výrazně silnější než ostatní spektrální čáry a znesnadňují interpretaci spekter. Pro jejich potlačení se využívá několika metod, nejběžněji používané jsou metody CHESS (CHEmical Shift Selective Imaging), SPIR (Selective Partial Inversion Recovery), STIR (Short Tau Inversion Recovery) nebo FLAIR (Fluid Attenuated Inversion Recovery) [31]. Sekvenci metody CHESS, sestávající ze tří 90° RF pulzů a tří gradientních pulzů, je možné vidět na obr. 2.27.



Obr. 2.27: Potlačení signálu vody pomocí metody CHESS.

3 KONVENČNÍ METODY ZPRACOVÁNÍ SIGNÁLŮ V MAGNETICKÉ REZONANCI

Předchozí kapitoly se zabývaly především fyzikálním pozadím nukleární magnetické rezonance a konkrétními měřicími technikami. Nyní bude následovat přehled konvenčních metod používaných k zpracování signálů v NMR, které zahrnují především běžně používané metody harmonické analýzy. Setkáme se však i s metodami specializovanými, např. pro separaci NMR spekter.

3.1 Harmonická analýza

Teoretické základy dnes zcela běžně používaných metod harmonické analýzy položil již v 18. století francouzský matematik Jean Baptiste Joseph Fourier (1768–1830). Cílem harmonické analýzy je získat *spektrum* signálu, tedy jeho frekvenční složky.

3.1.1 Fourierova transformace

Obraz spojitého komplexního signálu $s(t) \in \mathcal{L}^2$ s konečnou variací ve *Fourierově transformaci* (FT) je dán vztahem:

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} s(t)e^{-i\omega t} dt, \quad (3.1)$$

kde $\omega = 2\pi f$ je úhlová frekvence. Fourierova transformace tedy rozkládá nekonečně dlouhý signál na součet nekonečně (nespočetně) mnoha komplexních exponenciál. Frekvenční spektrum signálu lze samozřejmě převést zpět do časové oblasti pomocí zpětné Fourierovy transformace:

$$s(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} S(\omega)e^{i\omega t} d\omega. \quad (3.2)$$

Obraz signálu $s(t)$ ve Fourierově transformaci značíme $S(\omega) = \mathcal{F}[s(t)]$, zpětnou transformaci potom $s(t) = \mathcal{F}^{-1}[S(\omega)]$.

Vlastnosti

Nechť signály $s(t)$, $s_1(t)$, $s_2(t)$ mají konečnou energii a jejich spektra jsou po řadě $S(\omega)$, $S_1(\omega)$, $S_2(\omega)$. Pak platí následující tvrzení:

Tvrzení 3.1.1. *Fourierova transformace je lineární, tedy platí:*

$$\mathcal{F}[c_1 s_1(t) + c_2 s_2(t)] = c_1 \mathcal{F}[s_1(t)] + c_2 \mathcal{F}[s_2(t)] \quad (3.3)$$

pro libovolné konstanty $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$.

$$\mathcal{F}[s(at)] = \frac{1}{|a|} S\left(\frac{\omega}{a}\right) \quad (3.4)$$

pro libovolnou konstantu $a \in \mathbb{R}$, $a \neq 0$.

Násobením signálu $s(t)$ komplexní exponenciálou e^{iat} dojde k posunu ve frekvenční oblasti o a :

$$\mathcal{F}[s(t)e^{iat}] = S(\omega - a) \quad (3.5)$$

pro libovolnou konstantu $a \in \mathbb{R}$.

Posun signálu $s(t)$ v čase o a způsobí změnu fáze spektra

$$\mathcal{F}[s(t - a)] = e^{-ia\omega} S(\omega) \quad (3.6)$$

pro libovolnou konstantu $a \in \mathbb{R}$.

Násobení signálů $s_1(t)$ a $s_2(t)$ v časové oblasti odpovídá konvoluci ve frekvenční oblasti:

$$\mathcal{F}[s_1(t) \cdot s_2(t)] = S_1(\omega) * S_2(\omega). \quad (3.7)$$

3.1.2 Diskrétní Fourierova transformace

Diskrétní Fourierova transformace (DFT) signálu $\{s[n]\}_{n=0}^{N-1}$ s konečnou energií je rovna:

$$S[k] = \sum_{n=0}^{N-1} s[n] e^{-i2\pi \frac{k}{N} n}. \quad (3.8)$$

Zpětná DFT je pak analogicky:

$$s[n] = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} S[k] e^{i2\pi \frac{n}{N} k}. \quad (3.9)$$

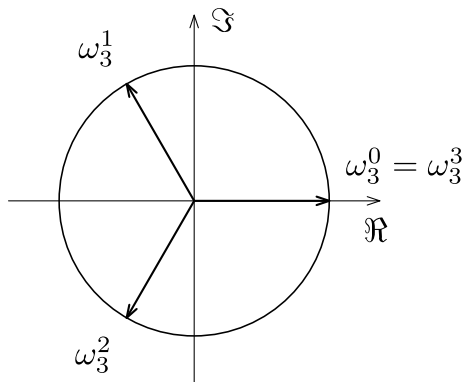
Obdobně jako Fourierova transformace, i DFT je lineární a má podobné vlastnosti. Diskrétní Fourierovu transformaci lze definovat i jiným způsobem, a sice formou operátoru definovaného maticí:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \omega_N^{0 \cdot 0} & \omega_N^{0 \cdot 1} & \dots & \omega_N^{0 \cdot (N-1)} \\ \omega_N^{1 \cdot 0} & \omega_N^{1 \cdot 1} & \dots & \omega_N^{1 \cdot (N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_N^{(N-1) \cdot 0} & \omega_N^{(N-1) \cdot 1} & \dots & \omega_N^{(N-1) \cdot (N-1)} \end{bmatrix}, \quad (3.10)$$

kde mocniny $\omega_N = e^{-i2\pi/N}$ jsou tzv. *twiddle faktory*. Obraz signálu v DFT pak bude roven maticovému součinu signálu a matice \mathbf{F} .

3.1.3 Rychlá Fourierova transformace

Časová složitost výpočtu DFT standardním způsobem je kvadratická, výpočet lze ale provést také v lineární časové složitosti. *Rychlá Fourierova transformace* využívá skutečnosti, že faktor ω_N je tzv. primitivní N -tý jednotkový kořen (primitive root of unity), což znamená, že $\omega_N^N = 1$ a $\omega_N^n \neq 1$ pro $n \in \{1, 2, \dots, N-1\}$ (viz obr. 3.1).



Obr. 3.1: Twiddle faktory tvoří body na jednotkové kužnici v komplexní rovině.

Pro čísla ω_N^n proto mimo jiné platí:

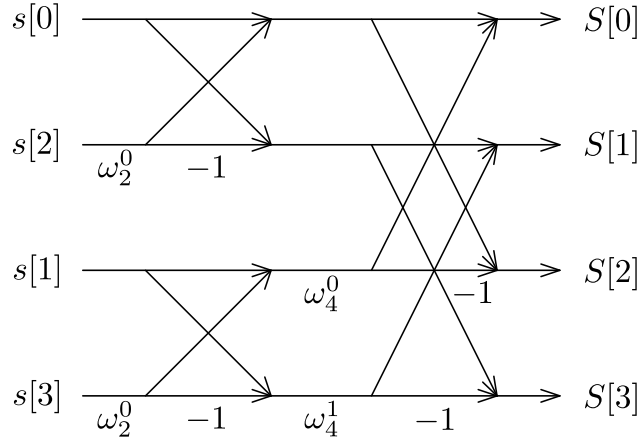
$$\omega_N^{N-n} = \overline{\omega_N^n} \quad (3.11)$$

pro libovolné $n \in \{0, 1, 2, \dots, N\}$. Toho lze s výhodou využít při konstrukci rychlých algoritmů diskrétní Fourierovy transformace.

Pravděpodobně nejznámějším algoritmem FFT je algoritmus *Cooley-Tukey*. Principem tohoto algoritmu je rozložení DFT původní délky N na menší úlohy, nejčastěji délky $N/2$ (radix-2), a to buď decimací v časové (decimation in time, DIT) nebo ve frekvenční (decimation in frequency, DIF) oblasti. Při decimaci v čase je suma (3.8) rozdělena na sudé a liché sčítance, výsledkem je pak kombinace dvou nezávislých DFT o poloviční délce:

$$\begin{aligned} S[k] &= \sum_{n=0}^{N-1} s[n] e^{-i\omega \frac{k}{N} n} \\ &= \sum_{n=0}^{N/2-1} s[2n] e^{-i\omega \frac{k}{N} (2n)} + \sum_{n=0}^{N/2-1} s[2n+1] e^{-i\omega \frac{k}{N} (2n+1)} \\ &= \underbrace{\sum_{n=0}^{N/2-1} s[2n] e^{-i\omega \frac{k}{N/2} n}}_{\text{DFT sudých koeficientů}} + e^{-i\omega \frac{k}{N}} \underbrace{\sum_{n=0}^{N/2-1} s[2n+1] e^{-i\omega \frac{k}{N/2} n}}_{\text{DFT lichých koeficientů}}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Tento postup lze opakovat rekurzivně na vzniklé DFT poloviční délky dokud nedosáhneme délky $N = 1$. Výsledný výpočet lze pak znázornit tzv. *motýlkovým diagramem* (viz obr. 3.2).



Obr. 3.2: Motýlkový diagram pro FFT délky $N = 4$ (radix-2 DIT).

Pomocí radix-2 algoritmu lze počítat efektivně pouze FFT délek $N = 2^n$, tedy mocnin dvojky. Existují však i algoritmy, které si poradí s libovolnou délkou signálu, dokonce i prvočíselnou.

3.1.4 Vícerozměrná Fourierova transformace

Fourierova transformace lze zobecnit do libovolně dimenzialního prostoru. Pro účely magnetické rezonance si však vystačíme s dvourozměrnou (resp. třírozměrnou) transformací. Dvourozměrná Fourierova transformace signálu $s(x, y) \in \mathcal{L}^2 \times \mathcal{L}^2$ je dána:

$$S(\omega_x, \omega_y) = \iint s(x, y) e^{-i(\omega_x x + \omega_y y)} dx dy, \quad (3.13)$$

kde ω_x resp. ω_y jsou prostorové úhlové frekvence. Zpětná 2D Fourierova transformace je analogicky rovna:

$$s(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint S(\omega_x, \omega_y) e^{i(\omega_x x + \omega_y y)} d\omega_x d\omega_y. \quad (3.14)$$

Jak by vypadala vícerozměrná Fourierova transformace je zřejmé.

3.1.5 Vícerozměrná diskrétní Fourierova transformace

Rozšíření diskrétní Fourierovy transformace na více rozměrů je triviální, neboť DFT je tzv. *separabilní*, což znamená, že vícerozměrnou transformaci lze provést prostým provedením jednorozměrné transformace postupně ve všech dimenzích. V případě dvou dimenzí je tedy dvourozměrná DFT signálu $s[x, y] \in \mathbb{C}^N \times \mathbb{C}^N$ rovna:

$$S[k_x, k_y] = \sum_{x=0}^{N_x-1} \left(\omega_{N_x}^{k_x x} \sum_{y=0}^{N_y-1} \omega_{N_y}^{k_y y} s[x, y] \right). \quad (3.15)$$

Inverzní transformaci lze opět provést po dimenzích:

$$s[x, y] = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x=0}^{N_x-1} \left(\bar{\omega}_{N_x}^{k_x x} \sum_{k_y=0}^{N_y-1} \bar{\omega}_{N_y}^{k_y y} S[k_x, k_y] \right). \quad (3.16)$$

Vícerozměrnou DFT lze urychlit použitím FFT po jednotlivých dimenzích a nebo využít např. vektor-radix FFT algoritmu, který je zobecněním jednorozměrného Cooley-Tukey algoritmu. Žádný algoritmus však neumí spočítat transformaci rychleji než v lineárním časové složitosti.

3.2 Rekonstrukce obrazu MRI

V kapitole 2.3.3 jsme se zabývali zakódováním prostorové informace do NMR signálů. Použitím tří gradientních magnetických polí jsme schopni ovlivnit rezonanční (Larmorovu) frekvenci jader v závislosti na poloze:

$$\omega(x, y, z) = \gamma(B_0 + G_x x + G_y y + G_z z). \quad (3.17)$$

Při měřicí sekvenci jsou jádra excitována a následná indukovaná odezva (FID) v čase je dána:

$$s(t) = M_0 e^{-t/T_2} \int_V \mathbf{m}_0(x, y, z) e^{i\omega(x, y, z)} dx dy dz, \quad (3.18)$$

kde $\mathbf{m}_0(x, y, z)$ je velikost lokální magnetizace, která odpovídá koncentraci jader v prostoru. Při vzorkování tohoto signálu je nutné jej demodulovat do základního pásma, po demodulaci odpovídá nulová úhlová frekvence rezonanční frekvenci $\nu = \gamma B_0$. Vztah k -prostoru k velikosti lokální magnetizace je pak po zanedbání vlivu T_2 -relaxace [44]:

$$S(k_x, k_y, k_z) = \int_V \mathbf{m}_0(x, y, z) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} dx dy dz. \quad (3.19)$$

Tato rovnice je základním vztahem zobrazování MRI. Způsob rekonstrukce výsledného obrazu pak závisí na zvolené trajektorii v k -prostoru.

3.2.1 Rekonstrukce pomocí DFT

Pokud byl obraz změřen podél kartézských souřadných os v k -prostoru, rekonstrukce obrazu je možná pomocí 2D resp. 3D diskrétní Fourierovy transformace. Po změření každé odezvy však musí být signál nejprve demodulován a to buď směšovačem před vzorkováním nebo přímo pásmovým vzorkováním.

Obvyklý způsob pořizování MRI obrazů využívá výběru vrstvy v ose z a dvourozměrného k -prostoru. Každá vrstva pak má svůj vlastní nezávislý dvourozměrný

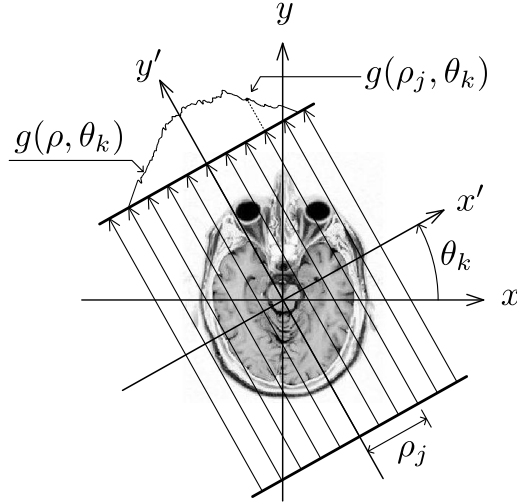
k -prostor. Výsledný obraz vznikne diskrétní Fourierovou transformací naměřených (diskrétních) hodnot v k -prostoru:

$$s[x, y] = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x=0}^{N_x-1} \left(\bar{\omega}_{N_x}^{k_x x} \sum_{k_y=0}^{N_y-1} \bar{\omega}_{N_y}^{k_y y} s[k_x, k_y] \right). \quad (3.20)$$

Kvůli T_2 -relaxaci, omezenému rozlišení k -prostoru a jiným vlivům obraz plně nekoresponduje s velikostí lokální magnetizace.

3.2.2 Zpětná projekce

Měření mohou probíhat kromě kartézského způsobu také podél radiálních čar v k -prostoru. Rekonstrukce takového obrazu je možná buď opět pomocí DFT (po interpolaci hodnot do 2D mížky – tzv. *gridování*) a nebo pomocí techniky známé z výpočetní tomografie (CT) – *Radonovy transformace*.



Obr. 3.3: Schéma Radonovy transformace – projekce obrazu podél přímek.

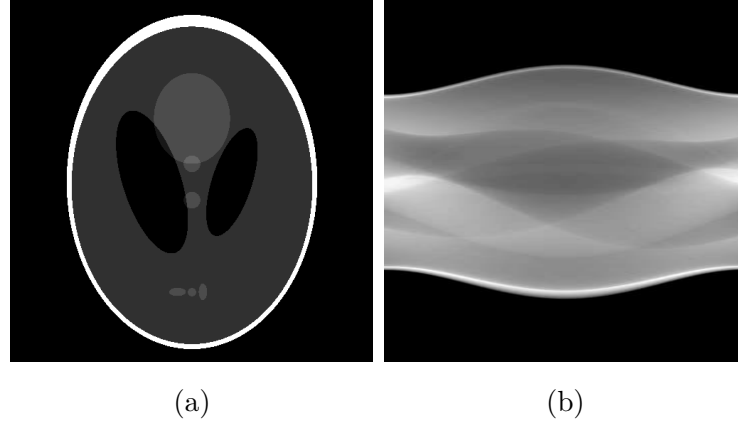
Radonova transformace (RT) je integrální transformace, která je založena na integrálu funkce podél přímek, což odpovídá principu rentgenového snímání, kdy každý bod výsledného obrazu je dán integrálem podél přímky kolmé na snímací rovinu. Situaci ilustruje obr. 3.3, projekcí obrazu pod úhlem θ_k dostaneme jednorozměrný signál $g(\rho, \theta_k)$, jenž je dán:

$$g(\rho_j, \theta_k) = \iint f(x, y) \delta(x \cos \theta_k + y \sin \theta_k - \rho_j) dx dy, \quad (3.21)$$

kde $\delta(x \cos \theta_k + y \sin \theta_k - \rho_j)$ značí přímku posunutou o ρ_j od počátku souřadnic otočenou pod úhlem θ_k . Pokud uvažujeme všechny hodnoty ρ a θ , získáme dvourozměrný signál:

$$g(\rho, \theta) = \iint f(x, y) \delta(x \cos \theta + y \sin \theta - \rho) dx dy. \quad (3.22)$$

Rovnice (3.22) definuje Radonovu transformaci, obraz v této transformaci je pak označován $\mathcal{R}\{f(x, y)\}$. Obrázek 3.4 ilustruje Radonovu transformaci na tzv. *Shepp-Loganově fantomu*.

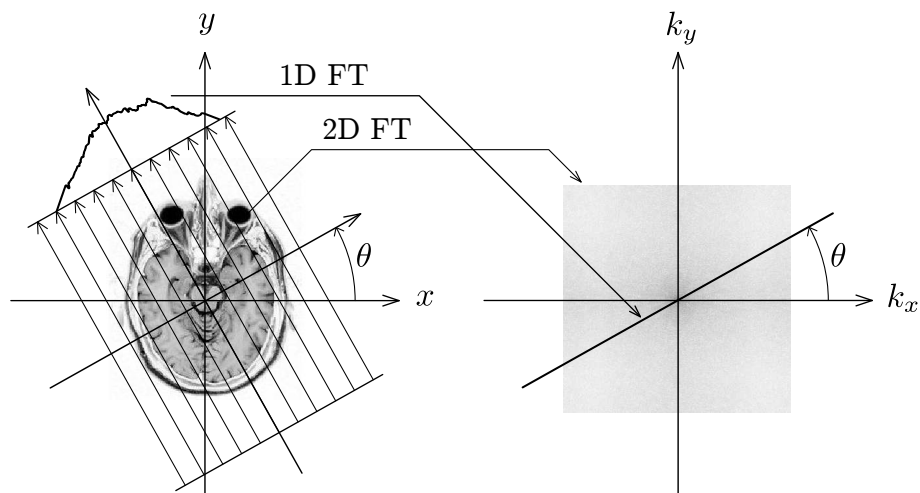


Obr. 3.4: a) Shepp-Loganův fantom (512×512 pixelů) a jeho b) Radonova transformace (tzv. *sinogram*).

Duální transformace k RT je obvykle nazývána *zpětná projekce* (backprojection) a je dána:

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dy} \mathcal{H}[g(\rho, y - \rho x)] d\rho, \quad (3.23)$$

kde $\mathcal{H}\{\cdot\}$ značí Hilbertovu transformaci. Zpětná projekce však nevrací původní obraz, ale jeho konvoluci s Gaussovským jádrem, tedy rozmazaný původní obraz. Lze ale ukázat, že Radonova transformace úzce souvisí s Fourierovou transformací a



Obr. 3.5: Vztah Radonovy a Fourierovy transformace – tzv. *Fourier-Slice teorém* [24].

využít této skutečnosti k odvození efektivní a především korektní inverzní transformace. Koeficienty ve dvourozměrné Fourierově transformaci ležící podél přímek procházejících počátkem souřadnic odpovídají jednorozměrné FT projekcí v Radonově transformaci (viz obr. 3.5). Tento fakt je běžně nazýván *Fourier-Slice teorém* nebo také *Projection-Slice teorém* [24].

Vyjádríme-li obraz $f(x, y)$ jako Fourierovu transformaci svého spektra a nahradíme-li kartézské souřadnice polárními ($k_x = \omega \cos \theta$ resp. $k_y = \omega \sin \theta$), dostaneme:

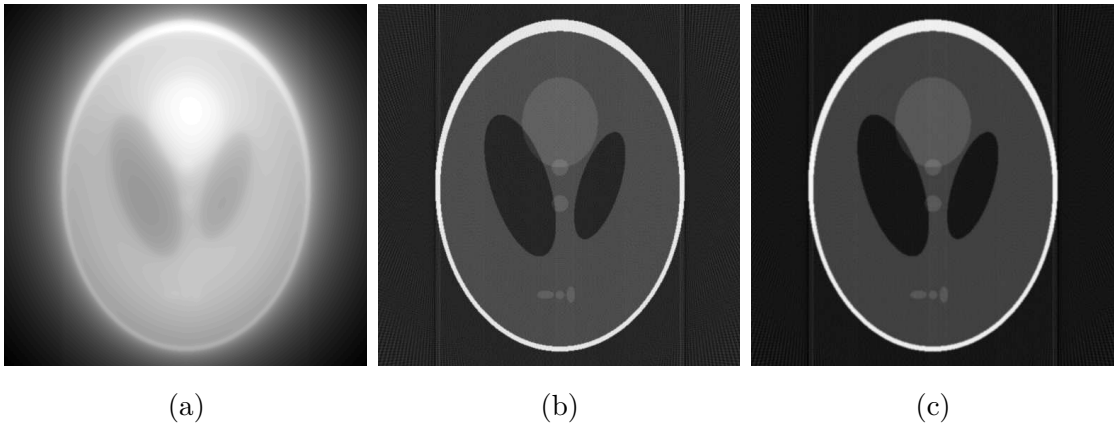
$$\begin{aligned}
 f(x, y) &= \iint F(k_x, k_y) e^{i(xk_x + yk_y)} dk_x dk_y \Big|_{k_x = \omega \cos \theta, k_y = \omega \sin \theta} \\
 &= \int_0^{2\pi} \int_0^\infty F(\omega \cos \theta, \omega \sin \theta) e^{i\omega(x \cos \theta + y \sin \theta)} \omega d\omega d\theta \\
 &= \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \omega G(\omega, \theta) e^{i\omega(x \cos \theta + y \sin \theta)} d\omega d\theta \\
 &= \int_0^\pi \int_{-\infty}^\infty |\omega| G(\omega, \theta) e^{i\omega(x \cos \theta + y \sin \theta)} d\omega d\theta \\
 &= \int_0^\pi \left[\int_{-\infty}^\infty |\omega| G(\omega, \theta) e^{i\omega\rho} d\omega \right]_{\rho = x \cos \theta + y \sin \theta} d\theta,
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

kde $G(\omega, \theta) = \int g(\rho, \theta) e^{i\omega\rho} d\rho$ je obraz jedné projekce v 1D Fourierově transformaci. Tomuto výrazu se říká *filtrovaná zpětná projekce* (filtered backprojection) [24].

Poslední řádek rovnice (3.24) obsahuje ve svém vnitřním výrazu inverzní 1D Fourierovu transformaci obrazu $G(\omega, \theta)$ násobeného faktorem $|\omega|$, na což lze pohlížet jako na lineární filtr s frekvenční charakteristikou $H(\omega) = |\omega|$ (filtr typu Ramp).

Vlivem faktoru $|\omega|$ obsahuje obraz artefakty. Tyto artefakty je možné potlačit váhovaním např. Hammingovým oknem, výsledný vztah pak bude ve tvaru:

$$f(x, y) \int_0^\pi \left[\int_{-\infty}^\infty h(\omega) |\omega| G(\omega, \theta) e^{i\omega\rho} d\omega \right]_{\rho = x \cos \theta + y \sin \theta} d\theta, \tag{3.25}$$



Obr. 3.6: Srovnání rekonstrukce pomocí a) zpětné projekce a filtrované zpětné projekce (filtr typu b) Ramp resp. c) Ramp vážený Hammingovým oknem).

kde $h(\omega)$ je váhovací okno dané:

$$h(\omega) = \begin{cases} c + (c - 1) \cos \frac{\omega}{M-1} & 0 \leq \omega \leq (M - 1) \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases} \quad (3.26)$$

Pro $c = 0.54$ se jedná o Hammingovo okno, pro $c = 0.5$ o Hannovo okno. Takto upravená rekonstrukce pak nese označení *filtrovaná zpětná projekce* (filtered back-projection) [24]. Srovnání rekonstrukce pomocí prosté zpětné projekce a filtrované zpětné projekce ilustruje obr. 3.6.

3.3 Zpracování NMR spekter

Kvantifikace dat získaných měřením je klíčovou částí NMR experimentu. Existují v zásadě dva základní přístupy – kvantifikace ve frekvenční oblasti a kvantifikace v časové oblasti. Typická NMR spektra obsahují mnoho vzájemně se překrývajících spektrálních čar, což velmi znesnadňuje jejich separaci.

3.3.1 Kvantifikace ve frekvenční oblasti

Nejjednodušší metodou kvantifikace spekter je integrování spektra. Ve spektru jsou nejprve identifikovány spektrální čáry a jejich kvantifikace pak spočívá v integraci části spektra odpovídající skupině ekvivalentních jader (v případě multiplicity signálu tedy i více spektrálních čar). Tato metoda je použitelná pouze v případech, kdy nedochází k překrývání spektrálních čar, což téměř vylučuje její použití v in vivo spektroskopii, kde spektrum nemá vysoké rozlišení.

Lepších výsledků můžeme dosáhnout použitím metod pracujících s modelem signálů, které se snaží nalézt takové parametry modelu, které co nejvíce odpovídají naměřenému spektru. Zároveň je možné jako vstup modelu dodat apriorní informace o signálech, které zpřesní celý proces. Většina modelů využívá jako model spektrální čáry *Lorentzovu funkci*:

$$f(x, a, \lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{\lambda}{(x - a)^2 + \lambda^2}, \quad (3.27)$$

kde $a = x_0$ určuje umístění maximální hodnoty této funkce a parametr λ ovlivňuje měřítko. Cílem je rozložit spektrum na součet těchto funkcí, kde každá komponenta má svou intenzitu, šířku, střední frekvenci a úhel.

Jednou z metod pracujících na tomto principu je TLS (Total LineShape). Umožňuje kromě zadání apriorní informace také modelování zkreslení spektrální čáry a pro řešení využívá Gauss-Newtonova algoritmu. Sofistikovanější metodou je pak LCModel – modelem je zde lineární kombinace spekter metabolitů, úloha je řešena regularizací. Díky své přesnosti je použitelná i pro in vivo spektroskopii [37].

3.3.2 Kvantifikace v časové oblasti

Metody kvantifikace spekter v časové oblasti dávají odhad s maximální věrohodností (maximum likelihood, ML). Typicky řeší nelineární problém nejmenších čtverců (nonlinear least-squares, NLLS). První široce využívanou metodou bylo VARPRO (Variable Projection for NLLS Problems), řešící optimalizační problém Levenberg-Marquardtovým algoritmem. Metoda AMARES (Advanced Method for Accurate, Robust and Efficient Spectral fitting) vylepšuje VARPRO a dosahuje vyšší robustnosti a flexibility [55].

3.3.3 Předzpracování dat

Naměřená data, především v in vivo MRS, často trpí nedostatky, které by znesnadnily kvantifikaci. Tyto nedostatky je potřeba odstranit před samotnou kvantifikací a nezáleží použité na kvantifikační metodě.

S klesající amplitudou FID také klesá poměr užitečného signálu k šumu. Pro zlepšení SNR celého signálu je proto vhodné naměřenou odezvu váhovat v časové oblasti klesající exponenciálou. Tím dojde k potlačení šumu v pozdější části odezvy, zlepšení SNR a zúžení spektrálních čar ve frekvenční oblasti, nevýhodou je ovšem snížené rozlišení spektra. Pokud signál vynásobíme naopak rostoucí exponenciálou, dojde k vyrovnání obálky FID, zvýšení rozlišení ve frekvenční oblasti, ale zároveň také k snížení SNR [55].

MRS signál je složen z mnoha komponent, část z nich je objektem našeho zájmu, jiné jsou však pro nás nezajímavé a mohou být odstraněny, aniž ovlivní výsledky měření. V kapitole 2.4.3 byly uvedeny techniky, které umožňují potlačení některých signálů přímo při měření. I při použití těchto metod obvykle zbyde v naměřeném signálu zbytek nežádoucích signálů. Pokud jsou tyto signály dobře separovány od užitečných signálů, je možné je vyfiltrovat. Pokud jsou však spektrální čáry nežádoucích signálů překryty s jinými čarami, je nutné použít modelování těchto signálů ke korektnímu odstranění [55].

Při použití kvantifikačních metod založených na modelech signálů nastává komplikace, pokud je signál zdeformován vlivem nehomogenit magnetického pole a nedokonalostí měřicího řetězce. Eliminace těchto vlivů je obvykle založena na porovnání referenčního signálu s modelem a následným aplikováním rozpoznaných deformací i na ostatní signály. To všem vyžaduje přítomnost dobře separovatelného referenčního signálu, což mnohdy není splněno [55].

4 ŘÍDKÁ REPREZENTACE SIGNÁLŮ

Tato kapitola pojednává tzv. řídké reprezentaci signálů, což je možné chápat jako nedourčený systém lineárních rovnic, ve kterém existuje řešení, které má velmi malý počet nenulových proměnných. Tato tématická oblast historicky sahá až k prvnímu použití algoritmu Matching pursuit [36] a řídké dekompozici signálu na atomy pomocí Basis pursuit [13]. V současné době zaměstnává řadu výzkumníků, kteří zároveň mnohdy zásadně přispěli k teorii a aplikacím waveletové (vlnkové) transformace (80. a 90. léta 20. století). Stejně jako u waveletové transformace a jejích odnoží (curvelets, contourlets, shearlets a další), i v případě řídké reprezentace signálů dochází k prolínání inženýrských aplikací s abstraktní matematikou. Bez úzké spolupráce matematiků a inženýrů v této aktuální oblasti se nelze významněji pohnout kupředu. Teorie zahrnuje velké množství oborů matematiky: funkcionální analýzu, lineární algebru, konvexní a nekonvexní optimalizaci, pravděpodobnost, teorii nelineární aproximace.

Obecně lze aplikace hledat všude tam, kde je možné signál vyjádřit řídce ať už v nějaké „standardní“ bázi nebo v systému, který byl nalezen signálu „na míru“. Hlavními oblastmi aplikací dnes jsou především zpracování obrazu (kompresní snímání [12], zrychlení snímání v magnetické rezonanci [34], konstrukce tzv. fotoaparátu s jedním pixelem [18] nebo hyperspektrální zobrazování [22, 23]), odšumování signálů (denoising), odstraňování rozmazání (deblurring), doplňování chybějící informace v signálu (inpainting) [19]. Další aplikace lze nalézt např. v sérii článků [30, 29].

4.1 Značení a výchozí fakta

Skalární veličiny jako např. m, N budou značeny kurzívou, vektory a matice tučným řezem jako např. \mathbf{y}, \mathbf{A} . Vektory budou uvažovány jako sloupcové a pouze s konečným počtem prvků. Indexování prvků vektorů bude začínat jedničkou, tzn. $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^\top$. Počet prvků množiny (tzv. kardinalita) bude značena stejně jako absolutní hodnota; tj. např. $|\{-3, 2, 8, 9\}| = 4$. Jádro lineárního zobrazení určeného maticí \mathbf{A} bude značeno $\ker \mathbf{A}$.

Definice 4.1.1. *Nosičem vektoru \mathbf{x} je množina jeho indexů, v nichž má vektor nenulové hodnoty. Tato množinu je značena $\text{supp}(\mathbf{x})$. Tedy $\text{supp}(\mathbf{x}) = \{i \mid x_i \neq 0\}$.*

Např. pro signál $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_8]^\top = [0, 0, 3, 0, 4, 2, 0, 5]^\top$ platí $\text{supp}(\mathbf{x}) = \{3, 5, 6, 8\}$ a $|\text{supp}(\mathbf{x})| = 4$.

Definice 4.1.2. ℓ_p -norma vektoru $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$ je definována jako

$$\begin{aligned}\|\mathbf{x}\|_p &:= \left(\sum_{i=1}^N |x_i|^p \right)^{1/p} \quad \text{pro } 1 \leq p < \infty, \\ \|\mathbf{x}\|_p &:= \sum_{i=1}^N |x_i|^p \quad \text{pro } 0 < p < 1, \\ \|\mathbf{x}\|_\infty &:= \max_i |x_i|, \\ \|\mathbf{x}\|_0 &:= |\text{supp}(\mathbf{x})|.\end{aligned}\tag{4.1}$$

O normu se ve skutečnosti jedná pouze v případě $1 \leq p \leq \infty$. Pro $0 < p < 1$ neplatí trojúhelníková nerovnost, takže se jedná o *kvazinormu*, a ℓ_0 není pozitivně homogenní a tedy se o normu také nejedná. Pro zjednodušení však bude v této práci pro všechna p použito jednotně označení ℓ_p -norma.

Norma $\|\cdot\|_1$ představuje součet absolutních hodnot prvků vektoru, $\|\cdot\|_0$ počet nenulových složek vektoru. Pro lepší představu o činnosti norm zobrazujeme v jednotlivých normách jednotkové koule.

Definice 4.1.3. Jednotková koule B_p^N v normě ℓ_p je definována jako

$$B_p^N := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{C}^N \mid \|\mathbf{x}\|_p \leq 1 \right\}.\tag{4.2}$$

Ilustrace jednotkových koulí v normách ℓ_0 , $\ell_{0.5}$, ℓ_1 a ℓ_2 je vidět na obrázku 4.1, jednotková koule v normě ℓ_0 kopíruje osy souřadného systému.

Definice 4.1.4. Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$ se nazývá *k-řídký* (*k-sparse*), pokud platí

$$\|\mathbf{x}\|_0 \leq k.\tag{4.3}$$

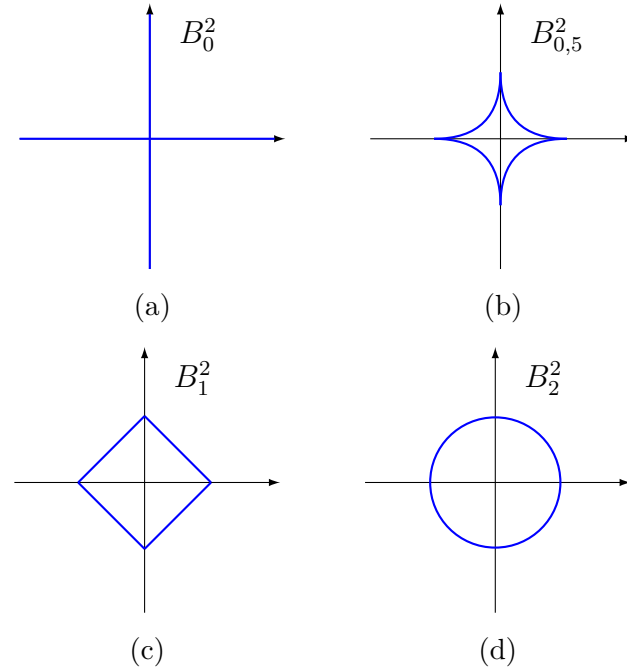
Tedy *k-řídký* vektor má nejvýše k nenulových složek. Relativní řídkost vektoru \mathbf{x} délky N pak označuje poměr $\frac{k}{N}$. Dále množina $\Sigma_k := \Sigma_k^N := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{C}^N \mid \|\mathbf{x}\|_0 \leq k \right\}$ je množina všech *k-řídkých* vektorů délky N .

Reálné signály nebývají řídké ve striktním smyslu, tak jak bylo definováno výše, ale místo nulových složek obsahují malé nenulové hodnoty. Z tohoto důvodu je vhodné definovat chybu aproximace:

Definice 4.1.5. Chyba nejlepší aproximace vektoru $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$ *k-řídkým* vektorem v normě ℓ_p (*best k-term approximation error*) je definována jako

$$\sigma_k(\mathbf{x})_p := \sigma_k^N(\mathbf{x})_p := \inf_{\mathbf{z} \in \Sigma_k^N} \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|_p.\tag{4.4}$$

Chyba aproximace tedy nemůže klesnout pod tuto hodnotu. Například pro $\mathbf{x} = [5, 2, 3]$ je $\sigma_2(\mathbf{x})_0 = 1$, $\sigma_2(\mathbf{x})_1 = 2$ a $\sigma_2(\mathbf{x})_2 = 2$. Pokud speciálně vektor \mathbf{x} je *k-řídký*, pak $\sigma_k(\mathbf{x})_p$ je jistě nulové pro jakékoliv p .



Obr. 4.1: Ilustrace jednotkových koulí a) B_0^2 , b) $B_{0,5}^2$, c) B_1^2 a d) B_2^2 .

Pro $T \subset \{1, \dots, N\}$ značí $\mathbf{x}_T \in \mathbb{C}^N$ vektor odvozený z $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$ tak, že prvky na pozicích patřících do množiny T jsou zachovány a ostatní vynulovány. Komplement T je značen $T^c = \{1, \dots, N\} \setminus T$.

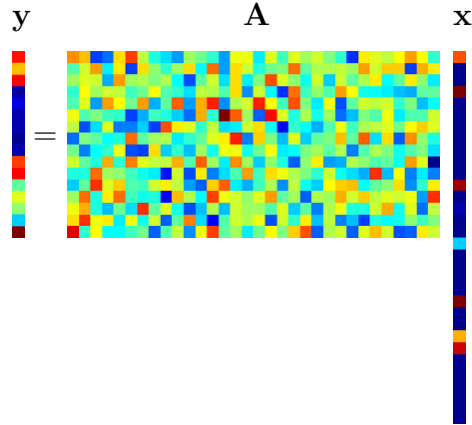
Jiný pohled na (4.4) je, že $\sigma_k(\mathbf{x})_p$ vyjadřuje p -normu vektoru, který vznikne z \mathbf{x} odstraněním k složek s největší velikostí [21, 15]. Lze tedy psát také $\sigma_k(\mathbf{x})_p = \min_{T \subset \{1, \dots, N\}, |T| \leq k} \|\mathbf{x}_{T^c}\|_p$. Vzhledem k tomu, že určení chyby je vždy závislé na konkrétním \mathbf{x} , jedná se o *adaptivní* záležitost.

4.2 Řídká řešení systémů lineárních rovnic

Cílem úlohy je řešit obvyklou soustavu lineárních rovnic $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$, hledaný vektor \mathbf{x} má však být co nejřidší, tzn. má obsahovat pokud možno co největší počet nulových složek. Jedná se tedy o tuto úlohu:

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{vzhledem k} \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y} \quad (\text{P0})$$

kde známe vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^m$ (pozorování, měření, signál) a matici $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$. Má smysl uvažovat pouze případy, kdy $m < N$, resp. $m \ll N$, a \mathbf{A} je plné hodnosti (řádkové). Schéma úlohy je ilustrováno na obr. 4.2. Matice \mathbf{A} je nejčastěji nazývána *slovník* (dictionary), sloupce matice se jsou pak nazývány *atomy* (atoms).



Obr. 4.2: Schéma nedourčeného systému rovnic $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$. Vektor \mathbf{x} obsahuje pouze několik nenulových prvků (souřadnic), a tedy pozorovaný vektor \mathbf{y} je lineární kombinací pouze několika málo sloupců matice \mathbf{A} . Je zde použito pseudobarevné schéma, kdy modrá barva reprezentuje nulu, a čím teplejší barva, tím vyšší hodnota.

Všechna \mathbf{x} , která splňují $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$, jsou nazývána přípustná řešení (přípustné reprezentace vektoru \mathbf{y}). Z lineární algebry vyplývá, že za výše uvedených podmínek na matici \mathbf{A} existuje nekonečně mnoho přípustných řešení a tato řešení tvoří afinní prostor. Následující text se bude mimo jiné zabývat požadavky kladenými na matici \mathbf{A} , které zaručí možnost „rekonstrukce“ (sparse recovery) původního \mathbf{x} z \mathbf{y} . Jednoduché příklady takovýchto systémů lineárních rovnic je možné nalézt v článku [30].

4.2.1 Postačující podmínky pro jednoznačnost řešení

Důležitou vlastností pro rozhodování o existenci a vlastnostech řešení je do češtiny těžko přeložitelný pojem *spark* (doslova jiskra).

Definice 4.2.1 [17]. Číslo $\text{spark}(\mathbf{A})$ je nejmenší počet sloupců matice \mathbf{A} , které jsou lineárně závislé. Formálně

$$\text{spark}(\mathbf{A}) = \min_{\mathbf{z} \in \ker \mathbf{A}, \mathbf{z} \neq \mathbf{0}} \|\mathbf{z}\|_0. \quad (4.5)$$

Například pro matici

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 3 & 3 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

platí $\text{spark}(\mathbf{A}_1) = 4$, zatímco pro

$$\mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

je $\text{spark}(\mathbf{A}_2) = \text{spark}(\mathbf{A}_3) = 3$.

Pro nenulovou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$, kde $m < N$, platí, že spark může nabývat hodnot $\text{spark}(\mathbf{A}) \in \{2, \dots, m+1\}$. Hodnoty 2 je dosaženo, pokud jeden sloupec je přímo násobkem jiného. Čím menší je hodnota spark , tím musí být vektor \mathbf{x} řidší, aby byla zajištěna jedinečnost tohoto řešení.

Tvrzení 4.2.2 [5]. *Pokud má soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ řešení \mathbf{x} splňující*

$$\|\mathbf{x}\|_0 < \frac{\text{spark}(\mathbf{A})}{2}, \quad (4.8)$$

pak \mathbf{x} je nutně nejřidší možné řešení a žádné jiné řešení se stejnou řídkostí neexistuje.

Důsledkem tohoto tvrzení je, že pokud se podaří nalézt řešení s kardinalitou vyhovující (4.8), pak je jisté, že bylo zároveň nalezeno řešení původního problému (P0). Nalezení $\text{spark}(\mathbf{A})$ je bohužel srovnatelně výpočetně náročné jako řešení problému (P0) a proto je nutné hledat jednodušší způsob ověření jedinečnosti řešení. Předchozí tvrzení navíc poskytuje pouze postačující podmínku. Může tedy existovat nejřidší řešení nespĺňující (4.8).

Definice 4.2.3 [5]. *Vzájemná koherence (mutual coherence) matice \mathbf{A} je definována jako největší absolutní normalizovaný skalární součin dvou různých sloupců matice \mathbf{A} ,*

$$\mu(\mathbf{A}) = \max_{1 \leq j, k \leq N, j \neq k} \frac{|\mathbf{a}_j^\top \mathbf{a}_k|}{\|\mathbf{a}_j\|_2 \cdot \|\mathbf{a}_k\|_2}, \quad (4.9)$$

kde \mathbf{a}_j označuje j -tý sloupec matice \mathbf{A} .

Vzájemné koherence umožňuje zjistit „míru lineární závislosti“ mezi sloupci matice. Nulovou koherenci má pouze unitární matice, protože všechny dvojice jejích sloupců jsou ortogonální a tedy čitatel v (4.9) je nulový. V této práci jsou uvažovány pouze případy, kdy $m < N$, a je známo, že pro matice $m \times N$ plné hodnosti vždy dle [21] platí

$$\sqrt{\frac{N-m}{m(N-1)}} \leq \mu(\mathbf{A}) \leq 1, \quad (4.10)$$

přičemž levá rovnost platí pro tzv. grassmanovské framy [49]. V případě matic rozměru 100×200 je tedy $\mu \geq 0,071$. Úvod do teorie tzv. framů poskytují např. zdroje [14, 43].

Cílem je obvykle získat matici \mathbf{A} s co nejnižší koherencí, chování takové matice se totiž blíží chování unitární matice. Požadavek, aby byly atomy co nejvíce přizpůsobeny konkrétnímu typu signálu a poskytovaly tak komprimovanou reprezentaci signálu, často působí protichůdně, protože znamená jejich významnou korelaci.

Tvrzení 4.2.4 [5]. *Pro libovolnou matici \mathbf{A} platí*

$$\text{spark}(\mathbf{A}) \geq 1 + \frac{1}{\mu(\mathbf{A})}. \quad (4.11)$$

Ohraničením $\text{spark}(\mathbf{A})$ dostaneme tvrzení podobné 4.2.2:

Tvrzení 4.2.5 [5]. *Pokud má soustava $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ řešení \mathbf{x} splňující*

$$\|\mathbf{x}\|_0 < \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\mu(\mathbf{A})} \right), \quad (4.12)$$

pak \mathbf{x} je nutně nejřidší možné a je jediné takové. Navíc toto řešení lze dosáhnout ℓ_1 -minimalizací.

Cenou za jednodušší výpočet je silnější nerovnost.

Blíží-li se koherence nule, pravá strana (4.12) roste nad všechny meze. Naopak pokud se koherence blíží jedné, pravá strana jde k jedné. Proto přirozeně existuje snaha hledat a používat maximálně nekoherentní slovníky.

Lze ukázat, že pokud $\mu(\mathbf{A}) > 1/3$, z nerovnosti (4.12) plyne, že kardinalita řešení je pouze 1. Pro zmíněné grassmanovské framy dle (4.12) platí, že je-li nalezeno řešení \mathbf{x} kardinality 7 nebo méně, pak jde o nejřidší možné řešení.

Výše uvedené matice mají vzájemnou koherenci přibližně $\mu(\mathbf{A}_1) = 0,785$, $\mu(\mathbf{A}_2) = 0,970$, $\mu(\mathbf{A}_3) = 0,971$.

Speciální případ – slovník vytvořený sloučením dvou ortobází

Speciálním případem slovníku je případ, kdy se spojí dvě ortonormální báze dimenze N , tedy slovník má $2N$ sloupců a N řádků. Např. jednotková matice (tj. Diracova báze v časové oblasti) a matice Fourierovy transformace ($\mathbf{A} = [\mathbf{I} \ \mathbf{F}]$), nebo Fourierova báze a wavelety ($\mathbf{A} = [\mathbf{F} \ \mathbf{W}]$). Lze dokázat, že pokud $\|\mathbf{x}\|_0 < 1/\mu(\mathbf{A})$, pak \mathbf{x} je nutně nejřidší možné řešení. Podobně, pokud

$$\|\mathbf{x}\|_0 < (\sqrt{2} - 1/2)/\mu(\mathbf{A}),$$

pak \mathbf{x} je nejřidší možné řešení a lze jej najít pomocí ℓ_1 -minimalizace (viz část 4.3) [17]. Nabízí se srovnání s podmínkou (4.12).

Je známo, že dvojice \mathbf{I}, \mathbf{F} dosahuje minimální možné koherence pro páry ortobází, což je $1/\sqrt{N}$ [17].

Ortonormálních bází ve slovníku může být i více, odhadům typu (4.12) zahrnujícím $\mu(\mathbf{A})$ v těchto situacích se věnuje článek [26].

4.2.2 Výpočetní složitost problému (P0)

Předpokládejme, že platí $\text{spark}(\mathbf{A}) > 2k_0$ a existuje nějaké k_0 -řádké řešení soustavy. Podle tvrzení 4.2.2 je toto řešení nejřidší možné a navíc jednoznačné. Pro nalezení přesného řešení je nutné projít všech $\binom{N}{k_0}$ kombinací podmnožin sloupců matice. Tento problém je NP-těžký a tedy v reálné situaci, kdy N je vysoké číslo, v rozumném čase neřešitelný [5].

Pro získání řešení v rozumném čase je nutné vyměnit rychlost za riziko úbytku přesnosti. Aproximativními metodami, které je možné zhruba rozdělit do dvou skupin podle principu, na kterém se zakládají, se zabývá část 4.4.

4.3 ℓ_1 relaxace

Protože norma ℓ_0 není konvexní funkce, nelze problém (P0) řešit žádnou z metod konvexní optimalizace (konvexního programování), které jsou k dispozici [4].

Normy ℓ_p jsou však konvexní pro $p \geq 1$, viz obr. 4.3, 4.4 a proto se nabízí otázka, jestli by nebylo možné využít „nejbližší“ konvexní normu, tj. ℓ_1 , k alespoň přibližnému řešení NP-těžkého problému (P0), tedy řešit úlohu

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{vzhledem k} \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{y}. \quad (\text{P1})$$

V některých případech se řešení úloh (P0) a (P1) skutečně shodují, dokonce lze ukázat, že takových případů je „většina“.

Při uvažování zašuměných dat je úloha formulována následovně:

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2 \leq \delta. \quad (\text{P1}\delta)$$

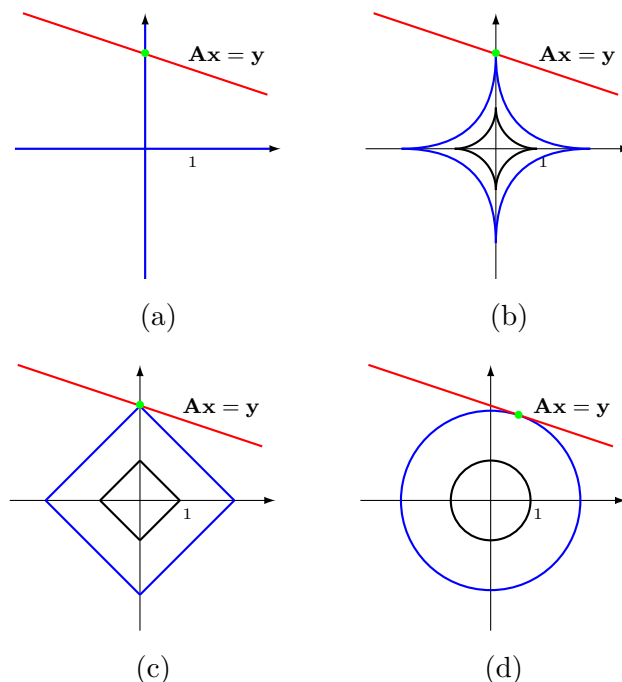
Povoluje se tedy odchylka od přesného řešení. Tento problém je známý pod zkratkou LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) [51].

4.3.1 Podmínky ekvivalence řešení ℓ_0 - a ℓ_1 -minimalizace

Řešení úlohy $\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_p$ vzhledem k $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ v \mathbb{R}^2 ilustruje obr. 4.3. Prostor všech přípustných řešení je zobrazen červenou přímkou. Je patrné, že řešení problémů (P0) a (P1) se shodují. V případě, že použijeme eukleidovskou normu, $p = 2$, se však řešení liší. Jedná se totiž o řešení s minimální energií, tedy řešení získané metodou nejmenších čtverců nebo Moore-Penroseovou pseudoinverzí.

Vizualizace na obrázcích 4.4a až 4.4c ukazují vždy dvě různé množiny přípustných řešení $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ v \mathbb{R}^2 :

$$x_1 - \frac{3}{10}x_2 = -30, \quad (4.13)$$



Obr. 4.3: „Nafukující se“ koule v normách a) ℓ_0 , b) $\ell_{0,5}$, c) ℓ_1 a d) ℓ_2 a jejich dotyk s nadrovinou určenou soustavou $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$. Koule v normě ℓ_0 zůstává vlastně stejná, neboť nezávisí na velikosti nenulových prvků.

resp.

$$x_1 - x_2 = 50, \quad (4.14)$$

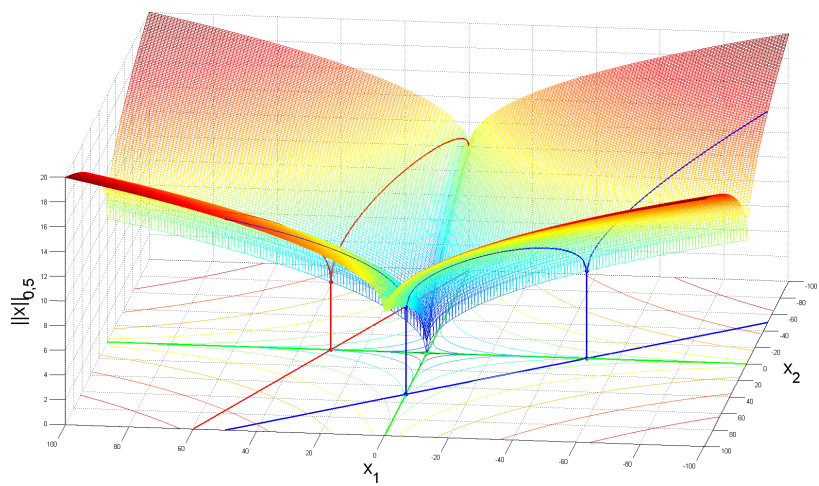
přičemž je prováděna postupně $\ell_{0,5}$ -, ℓ_1 - a ℓ_2 -minimalizace. Třetí souřadnice (x_3) představuje velikost normy vektoru $[x_1, x_2]$. Červená a modrá přímka reprezentují množiny přípustných řešení, průběh příslušných norem je pak zobrazen červenou (4.13), resp. modrou (4.14) křivkou.

Obrázek 4.4b mimo jiné objasňuje, kdy může ℓ_1 -minimalizace selhat při hledání řídkého řešení, modrá přímka přípustných řešení (4.14) je rovnoběžná s hranou jednotkové kružnice normy ℓ_1 . Existuje tedy nekonečně mnoho řešení s minimální normou, ovšem jenom ta řešení ležící na osách souřadného systému jsou řídká.

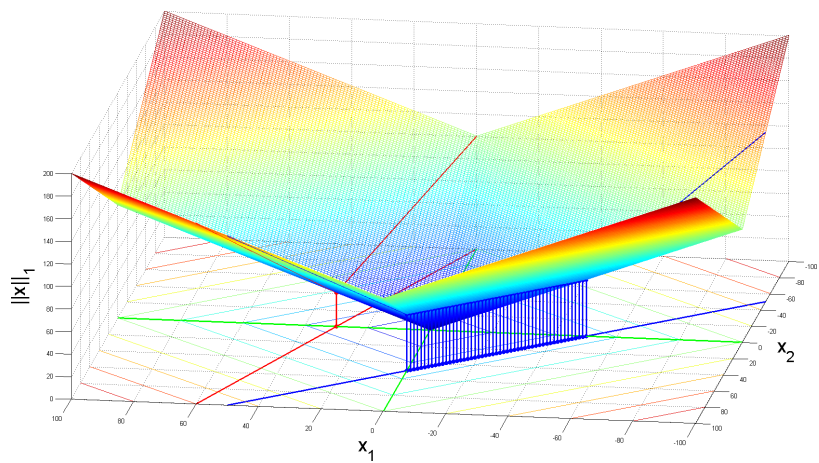
Obdobně obr. 4.4c zobrazuje normu ℓ_2 a stejné dvě úlohy. Nalezené řešení není nikdy řídké, proto se ℓ_2 -minimalizace (která je výpočetně relativně velice snadná) nehodí pro rekonstrukci řídkých signálů.

Ekvivalencí řešení problémů (P0) a (P1) se zabývá mnoho publikací, např. v článku [26] je dokázáno, že výše uvedená podmínka na řídkost řešení (4.12) zaručuje, že takového řešení nalezneme ℓ_1 -minimalizací.

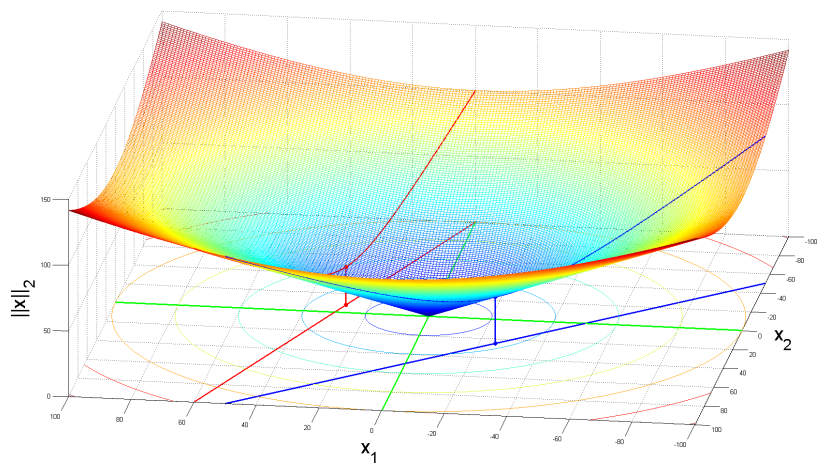
Dále budou uvedeny podmínky vztahující se na matici \mathbf{A} a na míru řídkosti vektoru \mathbf{x} .



(a)



(b)



(c)

Obr. 4.4: Vizualizace norem: a) $\ell_{0,5}$, b) ℓ_1 , c) ℓ_2 a řešení dvou odlišných úloh (4.13) a (4.14).

NSP – vlastnost nulového prostoru

Koncept *vlastnosti nulového prostoru* (Null Space Property, NSP) se objevil nejprve v pracích [17, 26], nicméně tento název dostal až později [15].

Definice 4.3.1 [21]. *Matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$ splňuje NSP řádu k s konstantou $\gamma \in (0, 1)$, pokud platí*

$$\|\boldsymbol{\eta}_T\|_1 \leq \gamma \|\boldsymbol{\eta}_{T^c}\|_1, \quad (4.15)$$

pro všechny množiny $T \subset \{1, \dots, N\}$, $|T| \leq k$ a pro všechny vektory $\boldsymbol{\eta} \in \ker \mathbf{A}$.

Pokud matice \mathbf{A} splňuje NSP, pak pro libovolný vektor z jádra $\ker(\mathbf{A})$ platí, že v něm bude norma koncentrována v „malém počtu“ prvků. Ověření NSP však není jednoduché.

Splnění NSP dále zajišťuje, že k -řádké řešení je jednoznačné a je možné jej nalézt ℓ_1 -minimalizací [17, 26]. Chyba nalezeného řešení je (i v ostatních případech) omezena shora:

Tvrzení 4.3.2 [21]. *Nechť matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$ splňuje NSP řádu k s konstantou $\gamma \in (0, 1)$. Nechť $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$, $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$ a $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^N$ je řešení ℓ_1 -minimalizace. Potom*

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_1 \leq \frac{2(1 + \gamma)}{1 - \gamma} \sigma_k(\mathbf{x})_1. \quad (4.16)$$

Pokud při splnění předpokladů tvrzení existuje nějaké nejvýše k -řádké řešení soustavy $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$, pak $\sigma_k(\mathbf{x})_1 = 0$. Pak $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_1 = 0$ a tedy $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, což znamená, že toto řádké řešení nalezneme i ℓ_1 -optimalizací.

Zároveň také platí, že pokud je možné ze soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ rekonstruovat všechny k -řádké vektory \mathbf{x} pomocí ℓ_1 -minimalizace, pak splňuje matice \mathbf{A} NSP řádu k s nějakou konstantou $\gamma \in (0, 1)$ [15]. NSP je tak ekvivalentní řádké ℓ_1 -rekonstrukci [21].

RIP – vlastnost zeslabené isometrie

Vlastnost zeslabené isometrie (Restricted Isometry Property, RIP) nabízí výpočetně přijatelnější alternativu k NSP, která je navíc stabilní i pod vlivem šumu. RIP se poprvé objevila v článku [11].

Definice 4.3.3 [21]. *Konstanta omezené isometrie δ_k matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$ je nejmenší číslo takové, že platí*

$$(1 - \delta_k) \leq \frac{\|\mathbf{Az}\|_2^2}{\|\mathbf{z}\|_2^2} \leq (1 + \delta_k) \quad (4.17)$$

pro všechny vektory $\mathbf{z} \in \Sigma_k^N$. Matice \mathbf{A} splňuje RIP řádu k s konstantou δ_k , pokud $\delta_k \in (0, 1)$.

Isometrie znamená, že lineární zobrazení zachovává délku vektorů, je tedy unitární. Zeslabení (restrikce) v případě (4.17) je dvojí: omezení pouze na všechny podmatice \mathbf{A} o k sloupcích a upuštění od přesné isometrie (je povolena malá odchylka δ_k – všechny takové podmatice musejí být tedy přibližně ortogonální).

Do definice RIP je nutné zahrnout *všechny* podmatice o maximálně k sloupcích, protože obecně dopředu není známo, které prvky vektoru \mathbf{x} budou nenulové a tedy které sloupce matice \mathbf{A} budou mít podíl na signálu \mathbf{y} . Proto je nutné zajistit, aby se libovolná kombinace nejvýše k sloupců co nejvíce blížila ortonormálnímu systému.

Výpočet RIP je možné (oproti NSP) provést přímo [21]:

$$\delta_k = \max_{T \subset \{1, \dots, N\}, |T| \leq k} \left\| \mathbf{A}_T^\top \mathbf{A}_T - \mathbf{I} \right\|_{2 \rightarrow 2}, \quad (4.18)$$

kde norma matice $\|\cdot\|_{2 \rightarrow 2}$ je dána:

$$\|\mathbf{B}\|_{2 \rightarrow 2} = \max_{\mathbf{x}} \frac{\|\mathbf{B}\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2}. \quad (4.19)$$

Podobně jako v případě NSP, i pomocí RIP lze určit chybu aproximace ℓ_1 minimalizací. Dokonce lze nalézt vztah mezi RIP a NSP.

Tvrzení 4.3.4 [21]. *Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$ splňuje RIP řádu $K = k + h$ s konstantou $\delta_K \in (0, 1)$. Pak \mathbf{A} splňuje NSP řádu k s konstantou*

$$\gamma = \sqrt{\frac{k}{h} \frac{1 + \delta_K}{1 - \delta_K}}. \quad (4.20)$$

Volbou $h = 2k$ se ukazuje, že RIP s konstantou δ_{3k} zaručuje splnění NSP řádu k s konstantou $\gamma = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{1 + \delta_{3k}}{1 - \delta_{3k}}}$, tudíž $\delta_{3k} < 1/3$ zaručuje $\gamma < 1$. Dle tvrzení 4.3.2 je potom pro všechny k -řádké vektory zaručena bezchybná rekonstrukce pomocí ℓ_1 -technik. Následující tvrzení uvádějí podmínky ohraničující shora odchylku řešení:

Tvrzení 4.3.5 [21]. *Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$ splňuje RIP řádu $3k$ s konstantou $\delta_{3k} < \frac{1}{3}$. Pro $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$, nechť $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ a $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^N$ je řešení ℓ_1 -minimalizace. Pak*

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2 \leq C \frac{\sigma_k(\mathbf{x})_1}{\sqrt{k}}, \quad (4.21)$$

kde C je konstanta (kterou zde neuvádíme) závisající pouze na δ_{3k} .

Jiný odhad uvádí [12]:

Tvrzení 4.3.6. *Nechť \mathbf{A} splňuje RIP řádu $2k$ s konstantou $\delta_{2k} < \sqrt{2} - 1 \approx 0,4142$. Pak*

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2 \leq C \frac{\sigma_k(\mathbf{x})_1}{\sqrt{k}} \quad (4.22)$$

a

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_1 \leq C \sigma_k(\mathbf{x})_1 \quad (4.23)$$

pro nějakou konstantu C .

V reálných úlohách musíme vždy počítat s přítomností nějakého typu šumu, následující tvrzení uvádí vlastnosti řešení při uvažování šumu:

Tvrzení 4.3.7 [21]. *Předpokládejme, že matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times N}$ vyhovuje RIP řádu $2k$ s konstantou*

$$\delta_{2k} < \frac{2}{3 + \sqrt{7/4}} \approx 0,4627. \quad (4.24)$$

Následující platí pro všechna $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$. Necht měření jsou zatížena šumem: $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{e}$, $\|\mathbf{e}\|_2 \leq \epsilon$, \mathbf{x}^ je řešením úlohy*

$$\min_{\mathbf{z}} \|\mathbf{z}\|_1 \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{A}\mathbf{z} - \mathbf{y}\|_2 \leq \epsilon. \quad (4.25)$$

Potom

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2 \leq C_1 \frac{\sigma_k(\mathbf{x})_1}{\sqrt{k}} + C_2 \epsilon \quad (4.26)$$

pro kladné konstanty C_1, C_2 závisující pouze na δ_{2k} .

Celková chyba je tedy rozdělena na část, jež závisí na řídčnosti, a část podmíněnou energií rušení. V případě $\delta_{2k} = 1/4$ jsou tyto konstanty $C_1 \leq 5,5$ a $C_2 \leq 6$ [12].

4.3.2 Matice vyhovující RIP

Předchozí části se zabývaly požadavky, které jsou kladeny na matici \mathbf{A} , aby byla zaručena řídka řešitelnost úlohy. Příklady matic, které vyhovují RIP, jsou uvedeny v této sekci.

Velké úsilí je věnováno zkonstruování deterministických matic, které by splňovaly RIP s předem definovanými parametry. Tato snaha je zatím poměrně neúspěšná, zatímco lze najít matice, které vznikají za přispění náhody a splňují RIP s vysokou pravděpodobností. Lze ukázat, že matice splňující RIP jsou velmi pravděpodobně např. ty, které vzniknou náhodným vybráním m řádků,

$$m \geq C \cdot k \cdot \ln(N/k), \quad (4.27)$$

z těchto $N \times N$ matic [12], kde C je opět vhodná konstanta:

- *Gaussovske matice* – prvky matice jsou nezávislé hodnoty z normálního rozdělení se střední hodnotou 0 a rozptylem $1/m$. Tyto matice splňují RIP řádu k s konstantou δ s pravděpodobností $1 - \vartheta$, pokud $m \geq c \cdot \delta^{-2}(k \ln(N/k) + \ln(1/\vartheta))$.
- *Bernoullijske matice* – každý prvek matice je náhodnou veličinou nabývající $\pm 1/\sqrt{m}$ se stejnou pravděpodobností (*alternativní* rozdělení). Vlastnosti těchto matic jsou velmi podobné vlastnostem gaussovských matic.

Lze ukázat, že RIP splňují i matice vzniklé výběrem řádků z matic, jež vznikají součinem dvou ortogonálních matic [12], nebo z náhodných cirkulantních matic [45].

Velkou výhodou matic Gaussova a Bernoulliho typu je, že jejich rekonstrukční schopnosti jsou invariantní vůči unitární transformaci [21].

4.4 Algoritmy pro hledání řídkých řešení

Existují dva základní přístupy pro nalezení řídkých řešení. Aktuální rychlý vzestup počtu nových algoritmů však ukazuje, že toto dělení je příliš hrubé. Jak už bylo řečeno výše, neexistuje metoda, která by vždy našla přesné řešení v polynomiálním čase, všechny metody jsou proto aproximativní.

Srovnání výpočetní náročnosti a přesnosti řešení jednotlivých algoritmů je možné najít např. v [28, 41, 42].

4.4.1 Relaxační algoritmy

Jak už vyplývá z názvu, relaxační algoritmy jsou založeny na ℓ_1 -relaxaci (viz sekci 4.3). Tyto algoritmy spoléhají na to, že se za určitých podmínek najdou řešení přesné nebo alespoň relativně blízké přesnému řešení.

Jedna z možných variant je „vyhladit“ ℓ_0 -normu a nahradit ji spojitou funkcí. Nejčastěji jde o nahrazení ℓ_0 -normy jinou kvazinormou ℓ_p , kde $p > 0$. Pro $p \geq 1$ je takto pozměněná úloha navíc řešitelná konvexní optimalizací.

Basis Pursuit

Algoritmus Basis Pursuit (BP), zveřejněný v roce 1995 [13], nahrazuje ℓ_0 -normu normou ℓ_1 a řeší tedy problém (P1 δ). Lze ukázat, že tento problém je ekvivalentní s problémem lineárního programování:

$$\min_{\tilde{\mathbf{x}}} \mathbf{1}^T \tilde{\mathbf{x}} \quad \text{vzhledem k} \quad \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{y}, \quad \tilde{\mathbf{x}} \geq 0, \quad (4.28)$$

kde $\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A} \ -\mathbf{A}]$, $\tilde{\mathbf{x}} = [\mathbf{x}_+^T \ \mathbf{x}_-^T]^T$ (\mathbf{x}_+ resp. \mathbf{x}_- značí kladné resp. záporné koeficienty vektoru \mathbf{x} , ostatní koeficienty jsou vynulovány). K řešení tohoto problému existuje mnoho algoritmů (simplexová metoda, Blandova metoda, Dantzigova metoda) [54].

IRLS

Další z řady relaxačních algoritmů je algoritmus Iterative Reweighted Least-Squares (IRLS) [25]. Tato metoda bývá také často nazývána jako FOCUSS (FOcal Underdetermined System Solver). Využívá reprezentaci ℓ_p normy (pro fixní $p \in (0, 1]$) jako váženou ℓ_2 normu. Jak už z názvu vyplývá, jedná se o iterační metodu.

Před prvním krokem je nejprve inicializována výchozí aproximace jako $\mathbf{x} = \mathbf{1}$ a základní váhovací matice $\mathbf{X} = \mathbf{I}$, kde \mathbf{I} je jednotková matice. Poté je v každé iteraci řešen lineární systém $\mathbf{x} = \mathbf{X}^2 \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X}^2 \mathbf{A}^T)^+ \mathbf{y}$ a to buď přímo nebo pomocí nějaké pomocné metody. Druhý a poslední krok v tomto cyklu je aktualizace váhovací matice \mathbf{X} : $\mathbf{X}(j, j) = |\mathbf{x}(j)|^{1-p/2}$. Tento iterační proces je zastaven po dosažení podmínky stanovené před začátkem samotného procesu. Pravidlo pro zastavení algoritmu je u IRLS nejčastěji rozdíl mezi vektorem \mathbf{x} v současném a předešlém kroku v ℓ_2 normě.

4.4.2 Žravé algoritmy

Žravé (greedy) algoritmy jsou iterační algoritmy hledající řídká řešení. Tyto algoritmy mají dva základní kroky: žravou selekci (greedy selection) a žravou aktualizaci (greedy update) [53].

V prvním kroku, žravé selekci, se vždy zvolí atom (nebo skupina atomů), který nejlépe aproximuje signál v dané iteraci. V tomto kroku předpokládáme, že optimální lokální výběr povede ke globálně optimálnímu řešení.

Ve druhé fázi iteračního procesu, žravé aktualizaci, je vybraný atom doplněn do aktuální aproximace celého signálu a je spočítána nová aproximace signálu, tentokrát i s nově přidaným atomem.

Po každé iteraci se algoritmus musí rozhodnout, zda přejde k další iteraci. Je tedy nutné nastavit ukončující podmínku. Nejčastěji se jako ukončující podmínka používá počet iterací nebo chyba řídké aproximace. Ve druhém případě se proces zastaví, když bude chyba $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2$ menší než nastavený práh.

Matching Pursuit

Matching Pursuit (MP) je jeden z prvních algoritmů, které byly použity k hledání řídkých řešení. Poprvé tento algoritmus použili Mallat a Zhang v roce 1993 [36]. Metoda vždy konverguje k řešení, i když často velice pomalu. Před samotným spuštěním tohoto iteračního algoritmu je nutné nejprve určit výchozí podmínky. Přepokládáme, že vektor řešení $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, reziduum $\mathbf{r} = \mathbf{y}$ a výchozí nosič $\mathbf{S} = \text{supp}(\mathbf{x}) = \{\}$.

V prvním kroku algoritmu je pak vždy vybrán atom, který nejlépe koreluje s aktuálním reziduem. Tuto část je možné formulovat jako hledání maxima vektoru $\mathbf{z} = |\mathbf{A}^T \mathbf{r}|$. Následně je označena pozice atomu ve slovníku jako z_{\max} (tento index označuje sloupec ve slovníku).

Ve druhé fázi tohoto algoritmu je aktualizován vektor řešení \mathbf{x} na pozici z_{\max} jako $\mathbf{x}(z_{\max}) = \mathbf{x}(z_{\max}) + \mathbf{A}_{z_{\max}}^T \mathbf{r}$. Index z_{\max} je přidán do nosiče \mathbf{S} a reziduu je aktualizováno: $\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{A}_{z_{\max}} \mathbf{A}_{z_{\max}}^T \mathbf{r}$. Tyto kroky jsou opakovány, dokud není splněna ukončující podmínka.

Algoritmus MP má však své velké limity. Čím méně je slovník ortogonální, tím menší je šance přesné rekonstrukce signálu. Pokud tento algoritmus vybere z nějakých důvodů v první fázi špatný atom, nelze již tuto chybu opravit v následujících iteracích. Navíc existují slovníky a signály, které MP neumožňuje optimálně řídit reprezentovat.

Orthogonal Matching Pursuit

Orthogonal Matching Pursuit (OMP) [40] je speciální varianta MP, která navíc provádí ortogonalizaci rezidua v každé iteraci. Při žravé aktualizaci je počítán odhad řídkého řešení \mathbf{x} jako minimum z $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2$ vzhledem k nosiči \mathbf{S} . Poté je spočteno reziduum $\mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{Ax}$ a testována ukončující podmínka.

Při implementaci je možné použít optimalizovaný postup. Prvky v nosiči \mathbf{S} jsou nejprve seřazeny, poté je spočteno reziduum jako $\mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{A}_{z_{\max}} \mathbf{A}_{z_{\max}}^+ \mathbf{y}$. Po splnění ukončující podmínky je vypočteno řídké řešení \mathbf{x} jako $\mathbf{x}_{\text{ss}} = \mathbf{A}_{\text{ss}}^+ \mathbf{y}$, kde \mathbf{x}_{ss} značí prvky z vektoru \mathbf{x} ve shodě s nosičem \mathbf{S} . Matice \mathbf{A}_{ss} pak označuje sloupce slovníku ve shodě s nosičem \mathbf{S} .

OMP je v dnešní době asi nejpoužívanějším algoritmem pro hledání řídkých řešení u obecných signálů s předem nedefinovanými specifickými vlastnostmi. Je používán zejména pro rychlost konvergence a výpočetní nenáročnost.

Thresholding algoritmus

Thresholding algoritmus nepatří do rodiny MP algoritmů. Je o mnoho jednodušší než předešlé algoritmy. Základní myšlenkou tohoto algoritmu je vybrat n největších vnitřních součinů jako předpokládaný nosič.

Nejprve je spočten vektor $\mathbf{a} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$ a prvky vektoru jsou seřazeny sestupně. Poté je v každé iteraci přidán další prvek z \mathbf{a} do nosiče \mathbf{S} . V každé iteraci je spočten vektor řídkého řešení $\mathbf{x} = \mathbf{A}_i^+ \mathbf{y}$ a reziduum $\mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{A}_i \mathbf{x}_i$. Po tomto přepočtu je kontrolována ukončující podmínka.

V jednoduchých případech i tento algoritmus může dávat optimální řídké řešení.

A* Orthogonal Matching Pursuit

A* Orthogonal Matching Pursuit (A*OMP) je částečně žravý algoritmus, který používá best-first search algoritmu A* Search, který je známý z teorie informace [32]. A*OMP hledá řešení v několika cestách ve stromu, kde jednotlivé cesty jsou ohodnoceny a označeny v závislosti na ohodnocovací funkci. Samotná cesta je počítána pomocí OMP.

A* Search algoritmus iteračně vybírá nejvíce perspektivní cestu ve stromu a rozšiřuje cestu přidáním nových uzlů. Uzly v tomto případě reprezentují jednotlivé

atomy. Při požadavku na k -řádké řešení je hledána optimální cesta s k uzly. A*OMP počítá více stromů paralelně. Největší problém algoritmu spočívá v inicializaci, je třeba určit, kolik atomů bude použito jako vrchol stromu, tzn. kolik stromů se bude počítat. Obvykle je volen počet stromů menší než k . Další otázkou je, jakým způsobem jsou přidávány uzly (atomy) do jednotlivých stromů. V ideálním případě by bylo pod kořen stromu přidáno $N - 1$ uzlů, což by ovšem bylo velice neefektivní. Existuje několik způsobů, které tento problém řeší, v A*OMP je použit OMP algoritmus. Celý problém oceňování jednotlivých cest je velice komplikovaný a částečně je popsány v [32].

A*OMP je nový perspektivní algoritmus pro výpočet řídkého řešení zejména v případech, kde je používáno uniformní nebo normální rozložení nenulových koeficientů.

4.4.3 Hybridní algoritmy

Hybridní algoritmy spojují vlastnosti relaxačních a žravých algoritmů. Řadí se do nich i speciální algoritmy pro různé aplikace, jako je např. CoSaMP (Compressive Sampling Matching Pursuit) [39]. Další kategorií algoritmů, kterou můžeme zařadit do této skupiny, je skupina algoritmů tzv. Iterative-Shrinkage [19].

4.5 Komprimované snímání

Obvyklý způsob snímání a komprese dat je založena na sběru kompletních dat, provedení vhodné transformace nad těmito daty a vyhodnocením získaných koeficientů většinu z nich nevyužít („vyhodit“), protože z nějakého důvodu nesou málo informace. Například při použití kompresního formátu JPEG jsou nejprve získány všechny pixely fotografie (řekněme 10 milionů), následně je provedena dvojrozměrná diskrétní kosinová transformace – DCT – a vzniklé koeficienty jsou kvantovány. Po nechání pouze k koeficientů (nejčastěji těch největších) a zakódování pouze jejich pozice/indexu pak odpovídá *adaptivnímu* přístupu k signálu, který souvisí s chybou nejlepší aproximace (4.4). Tento přístup je u běžných signálů (fotografie) funkční proto, že je možné nalézt takovou reprezentaci (zde DCT), ve které je signál řídký nebo přibližně řídký.

Komprimované snímání (compressed sensing, compressive sampling, CS) tento princip opouští a přichází s jinou strategií. Za předpokladu, že je signál (přibližně) řídký v nějaké vhodné reprezentaci, je signál rovnou snímán *lineárně* a *neadaptivně*. Počet získaných vzorků je pak nižší než počet vzorků signálu, je možné provést pouze takový počet měření, který je potřeba k rekonstrukci.

Předpokladem tedy je, že je signál řídký v nějakém slovníku, nejčastěji v nějaké ortonormální bázi Ψ . Signál \mathbf{z} má tedy vyjádření $\mathbf{z} = \Psi \mathbf{x}$, kde \mathbf{x} je k -řídký. Cílem je provést „malý počet“ neadaptivních měření, které budou mít charakter skalárních součinů se signálem: $\mathbf{y} = \mathbf{Pz} = \mathbf{P}\Psi\mathbf{x}$. Matice \mathbf{P} rozměru $m \times N$ je pak nazývána *měřicí* (snímací) *matice* a jednotlivé složky vektoru \mathbf{y} o délce $m \ll N$ jsou změřené hodnoty, které vznikají jako lineární kombinace vzorků signálu.

Fáze rekonstrukce signálu je ovšem už nelineární a časově výrazně náročnější, technikami ℓ_1 -minimalizace probíhá následovně:

$$\mathbf{x}^1 := \arg \min \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{vzhledem k} \quad \mathbf{y} = \mathbf{P}\Psi\mathbf{x}, \quad (\text{P1U})$$

přičemž existují podmínky, za kterých se tímto dosáhne nejřidšího řešení. Samotný signál \mathbf{z} je pak jednoduše získán jako $\mathbf{z} = \Psi\mathbf{x}^1$.

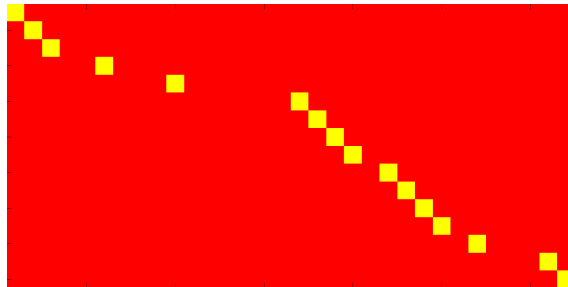
V literatuře lze najít, že vhodné měřicí matice \mathbf{P} se uvažují ve tvaru $\mathbf{P} = \mathbf{R}\Phi$. Zde Φ je matice o rozměrech $N \times N$ a \mathbf{R} je matice, která vznikne z jednotkové matice $N \times N$ ponecháním pouze m náhodně vybraných řádků. Funguje tedy jako náhodný výběr řádků z Φ s rovnoměrným rozdělením pravděpodobnosti. Příklad matice \mathbf{R} je na obr. 4.5, ilustrace celkové situace pak na obr. 4.6.

Roli matice \mathbf{A} z 4.2 hraje nyní matice $\mathbf{A} := \mathbf{R}\Phi\Psi$. Otázkou opět je, jak zvolit Φ a m , aby \mathbf{A} umožňovala rekonstrukci signálu ℓ_1 -technikami. Odpověď na tuto otázku dává mimo jiné vzájemná koherence μ . Ve speciálním případě, kdy je matice složena ze dvou ortonormálních bází Φ a Ψ , tedy $[\Phi, \Psi]$, pro vzájemnou koherenci platí

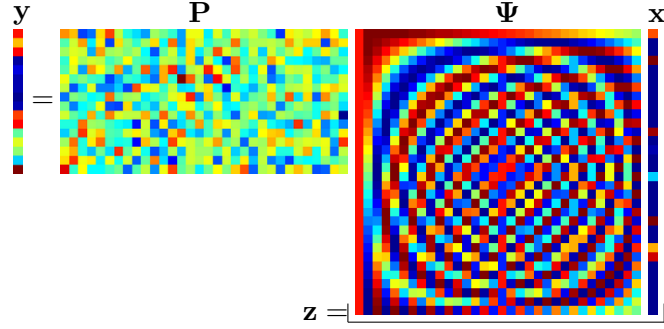
$$\mu([\Phi, \Psi]) = \max_{1 \leq i, j \leq N} |\psi_i^\top \phi_j| \quad (4.29)$$

a hodnota (4.29) se pohybuje mezi $\frac{1}{\sqrt{N}}$ a 1. Přesná rekonstrukce z m měření je zaručena při splnění následujících požadavků:

Tvrzení 4.5.1 ([12, 8], Theorem 1). *Nechť je dán signál \mathbf{z} , který má v Ψ k -řádkou reprezentaci \mathbf{x} . Pak řešení ℓ_1 -minimalizace (P1U), kde \mathbf{y} jsou měření, je současně*



Obr. 4.5: Příklad matice \mathbf{R} , která vznikla z jednotkové matice $N \times N$ náhodným ponecháním pouze m řádků (zde $N = 32$, $m = 16$).



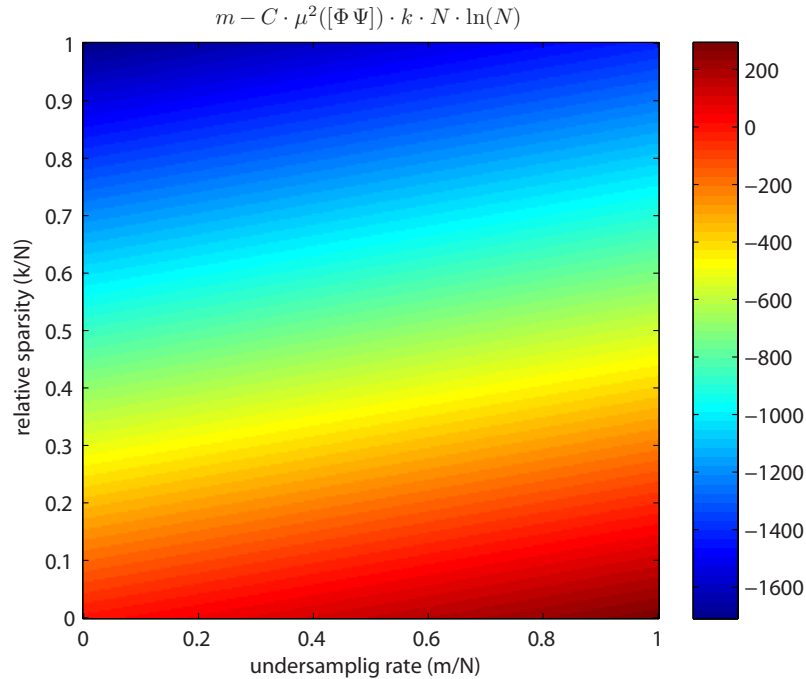
Obr. 4.6: Ilustrace situace při komprimovaném snímání: naměřený vektor \mathbf{y} je roven součinu měřicí matice $\mathbf{P} = \mathbf{R}\Phi$, unitární matice Ψ a řídkého vektoru \mathbf{x} . Do procesu snímání vstupuje vektor \mathbf{z} , který je pozorovatelný a není sám řídký, ale je řídký v nějaké bázi Ψ , zde v ortonormální bázi zpětné DCT.

s vysokou pravděpodobností nejřidší možné, pokud je zvoleno

$$m \geq C \cdot \mu^2([\Phi, \Psi]) \cdot k \cdot N \cdot \ln N, \quad (4.30)$$

pro nějakou kladnou konstantu C .

Z nerovnice (4.30) a její ilustrace na obr. 4.7 plyne, že počet potřebných měření závisí na řídkosti signálu pouze *lineárně*. Koherence mezi ortobázemi Φ a Ψ *kva-*
draticky ovlivňuje nutný počet měření, což vysvětluje snahu hledat takové dvojice,



Obr. 4.7: Vizualizace nerovnice (4.30) pro $N = 300$, $C = 1$ a $\mu([\Phi, \Psi]) = 1/\sqrt{N} \doteq 0,058$. Změnou konstanty C dojde k posunutí a změně sklonu nulové vrstevnice.

jejichž koherence je minimální. Je například známo, že minimální koherence $1/\sqrt{N}$ dosahuje dvojice $[\mathbf{I}, \mathbf{F}]$ – v takovém případě dle (4.30) počet měření musí být řádově pouze $k \cdot \ln N$. Naopak, s rostoucí koherencí přestává být měření dle podmínky (4.30) výhodné, v určitém momentu pak přestává mít zcela smysl, neboť počet měření m přeroste počet vzorků signálu N .

V aplikacích pro rychlé snímání záznamů z magnetické rezonance (MRI) je z fyzikální podstaty problému $\Phi = \mathbf{F}$ a $\Psi = \mathbf{I}$ nebo $\Psi = \mathbf{W}$. Jsou tedy měřeny náhodně vybrané spektrální koeficienty signálu, který je řídký buďto přímo v prostorové oblasti nebo ve waveletové oblasti [12, 8, 34].

Podmínky, za kterých dojde ke korektní rekonstrukci signálu pomocí ℓ_1 -technik, je možné stanovit i na základě vlastnosti zeslabené isometrie – RIP. Při uvažování matic $\mathbf{P} = \mathbf{R}\Phi$, kde Φ jsou gaussovského a bernoulliovského typu, víme, že takové matice \mathbf{P} s vysokou pravděpodobností splňují RIP, pokud $m \geq C \cdot k \cdot \ln(N/k)$. Gaussovské a bernoulliovské matice mají důležitou vlastnost – invarianci vůči unitární transformaci (viz sekci 4.3.2) [21], což znamená, že pokud \mathbf{P} vyhovuje RIP, pak pro $\mathbf{P}\Psi$ platí totéž a tedy celá \mathbf{A} vyhovuje RIP. Uvedené matice jsou tedy „univerzální“, neboť nezávisí na ortonormální bázi, ve které je signál řídký. Je také zajímavé, že matice Ψ vůbec nemusí být známa při snímání, nýbrž pouze při rekonstrukci.

V případě dvou (deterministických) ortonormálních bází Φ a Ψ platí dle [12, 46], že pro úspěšnou rekonstrukci je potřeba $m \geq C \cdot k \cdot (\ln N)^4$ měření. Přepokládá se (zatím nebylo dokázáno), že platí mnohem slabší podmínka bez mocniny v uvedené nerovnosti.

5 REPREZENTACE SIGNÁLŮ S NÍZKOU HODNOSTÍ

Odlišným přístupem k rekonstrukci signálů obsahujících omezené množství informace je aproximace s nízkou hodnotí. Některé reálné signály, pokud je vhodně reprezentujeme maticí, lze rozložit na velmi malý počet *komponent*, které je dobře aproximují. Tato problematika úzce souvisí s tzv. *analýzou hlavních komponent*. Aplikace pak lze hledat všude tam, kde je signál mnohodomenzionální a redundantní, např. v *hyperspektrálním zobrazování*.

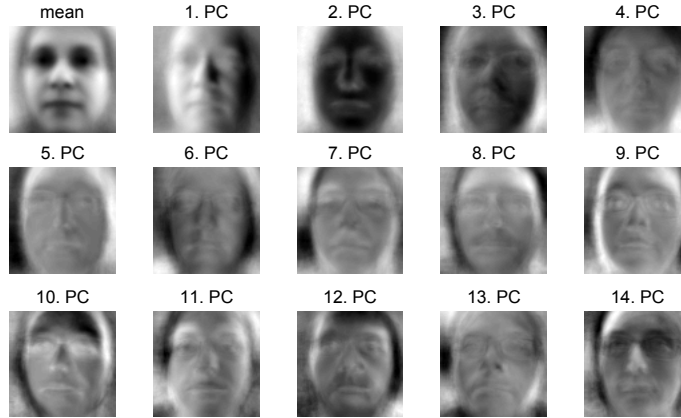
5.1 Analýza hlavních komponent

Analýza hlavních komponent (Principle Component Analysis, PCA) je vícerozměrná statistická metoda, která umožňuje identifikovat hlavní komponenty nějakého souboru dat (více realizací nějaké náhodné vícerozměrné veličiny). Tyto hlavní komponenty reprezentují „směry“, ve kterých je v datech nejvyšší variabilita, všechny komponenty jsou navzájem ortogonální. Výsledkem PCA je transformační matice, pomocí které je možné data transformovat do jiného souřadného systému, ve kterém jsou dekorelována. Zachováním pouze několika koeficientů příslušejících nejvýznamnějším hlavním komponentám dochází k významnému snížení dimenzionality dat při nízké ztrátě informace, a tedy signál je velmi přesně aproximován.

Výpočet hlavních komponent lze provést více různými způsoby, pro názornost je však vhodné uvést výpočet pomocí *kovarianční metody*. Ta zahrnuje následující kroky [1]:

1. Uspořádání vstupních dat do matice $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N]$, kde N počet realizací vstupních dat a $\mathbf{x}_i \in \mathbb{C}^M$ jsou jednotlivé realizace o dimenzi M uspořádané ve sloupcích.
2. Odečtení střední hodnoty – $\widehat{\mathbf{X}} = \mathbf{X} - \bar{\mathbf{x}}\mathbf{u}$, kde $\bar{\mathbf{x}}[i] = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \mathbf{x}_j[i]$ a $\mathbf{u}[i] = 1$ pro $i \in \{1, 2, \dots, N\}$.
3. Spočtení kovarianční matice $\mathbf{C} = \frac{1}{N-1} \widehat{\mathbf{X}}\widehat{\mathbf{X}}^*$, $\mathbf{C} \in \mathbb{C}^{M \times M}$.
4. Nalezení vlastních vektorů kovarianční matice \mathbf{C} a tedy rozložení $\mathbf{C} = \mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}^{-1}$, kde $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{M \times M}$ obsahuje vlastní vektory \mathbf{q}_i uspořádané ve sloupcích a diagonální matice $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{C}^{M \times M}$ obsahuje na své diagonále vlastní čísla matice \mathbf{C} .
5. Uspořádání vlastních vektorů podle velikosti vlastních čísel sestupně.
6. Výběr podmnožiny vlastních vektorů jako bázových vektorů (např. podle kumulativní energie jednotlivých vlastních vektorů $\mathbf{g}[i] = \sum_{j=1}^i |\mathbf{\Lambda}_{j,j}|$).

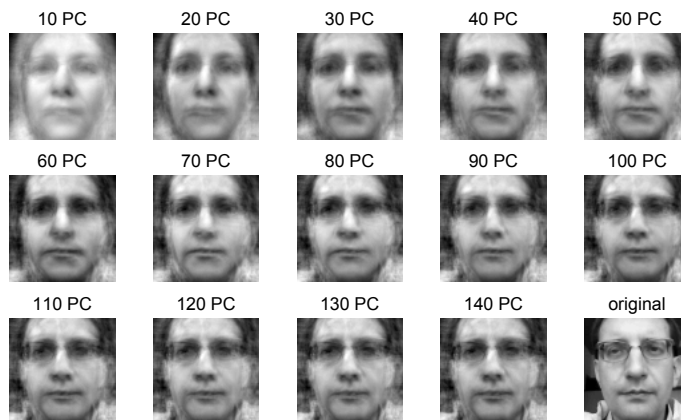
Výpočet PCA lze také (a efektivněji) provést pomocí rozkladu na singulární čísla (Singular Value Decomposition, SVD) [1]. Vstupní data $\widehat{\mathbf{X}}$ jsou (po odečtení střední



Obr. 5.1: Příklad použití PCA na obrázky obličejů.

hodnoty) rozložena na $\widehat{\mathbf{X}} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^*$, kde $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{M \times M}$ je unitární, $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{C}^{M \times N}$ je obdélníková diagonální a $\mathbf{V}^* \in \mathbb{C}^{N \times N}$ je také unitární. Hodnoty ležící na diagonále matice $\mathbf{\Sigma}$ jsou nazývány singulární čísla, sloupce matice \mathbf{U} resp. matice \mathbf{V} jsou pak levé resp. pravé singulární vektory. SVD tedy úzce souvisí s rozkladem na vlastní čísla a vektory, konkrétně levé singulární vektory matice $\widehat{\mathbf{X}}$ jsou vlastní vektory matice $\widehat{\mathbf{X}}\widehat{\mathbf{X}}^*$ (tedy kovarianční matice \mathbf{C} až na změnu měřítka) a pravé singulární vektory jsou vlastními vektory matice $\widehat{\mathbf{X}}^*\widehat{\mathbf{X}}$. Nenulové singulární čísla matice $\widehat{\mathbf{X}}$ pak odpovídají odmocnině vlastních čísel matice $\widehat{\mathbf{X}}\widehat{\mathbf{X}}^*$ nebo $\widehat{\mathbf{X}}^*\widehat{\mathbf{X}}$. Při výpočtu PCA tedy není nutné počítat (často velmi rozměrnou) kovarianční matici \mathbf{C} a výpočet je tak efektivnější.

Příklad použití PCA je demonstrován na sadě obrázků obsahujících obličej [6], střední hodnotu a prvních 14 hlavních komponent je možné vidět na obr. 5.1. Rekonstrukce vybraného obličeje pomocí různého počtu hlavních komponent je pak vidět na obr. 5.2.



Obr. 5.2: Rekonstrukce obličeje pomocí několika hlavních komponent.

5.2 Aproximace s nízkou hodnotí

Matice, jejichž vlastní (singulární) čísla mají výraznou klesající tendenci a většina energie je soustředěna v několika hlavních komponentách, lze velmi přesně aproximovat maticemi s nízkou hodnotí. Matici $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ s hodnotí $r \leq N$ lze reprezentovat N^2 čísly, avšak počet stupňů volnosti je pouze $(2N - r)r$ [7]. Analogicky k řídké reprezentaci signálů se tedy nabízí otázka, zda lze takovou matici rekonstruovat z menšího počtu prvků než N^2 . Oproti řídké reprezentaci signálů, kde byly nalezeny podmínky, za kterých je možné *vždy* nalézt dokonalou rekonstrukci, v případě rekonstrukce matice s nízkou hodnotí při znalosti pouze některých jejích prvků je možné pouze stanovit pravděpodobnost, s jakou bude nalezena původní matice.¹

Problém rekonstrukce lze formálně popsat následovně: Matice $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ je vzorkována pouze na pozicích patřících do množiny Ω ($(i, j) \in \Omega$, pokud je prvek $\mathbf{M}_{i,j}$ vzorkován). Kardinalita množiny Ω je $m = |\Omega|$, prvky patřící do této množiny rovnoměrně pokrývají celou matici \mathbf{M} . Pak rekonstrukci matice \mathbf{M} získáme řešením problému:

$$\min_{\mathbf{X}} \text{rank}(\mathbf{X}) \quad \text{vzhledem k} \quad \mathbf{X}_{i,j} = \mathbf{A}_{i,j} \quad (i, j) \in \Omega, \quad (\text{PLR})$$

kde $\text{rank}(\mathbf{X})$ je hodnota matice \mathbf{X} [7]. Analogicky k řídké reprezentaci signálů, i tento problém je NP-těžký, je tedy nutné jej řešit heuristicky:

$$\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{X}\|_* \quad \text{vzhledem k} \quad \mathbf{X}_{i,j} = \mathbf{A}_{i,j} \quad (i, j) \in \Omega, \quad (\text{PN})$$

kde $\|\mathbf{X}\|_* = \sum_{k=1}^N |\sigma_k(\mathbf{X})|$ je nukleární norma matice \mathbf{X} , tedy součet absolutních hodnot singulárních čísel této matice [7]. Problémy (PLR) a (PN) jsou v podobném vztahu jako problémy (P0) a (P1) v oblasti řídké reprezentace signálů, především nukleární norma je konvexní funkce a lze tedy použít techniky konvexní optimalizace pro řešení problému (PN). Podmínky, za kterých bude rekonstrukce s vysokou pravděpodobností úspěšná, uvádí článek [7].

5.3 Hyperspektrální zobrazování

Hyperspektrální zobrazování (Hyperspectral Imaging, HSI) oproti klasickému pořizování snímků (tři barevné kanály) shromažďuje data z mnoha pásem frekvenčního spektra ve viditelné oblasti i mimo ni. Uplatnění lze nalézt v mnoha oborech lidské činnosti, např. geologii, astronomii nebo také v armádě. Data získaná hyperspektrálním zobrazováním jsou mnohadimenzionální a obvykle vysoce redundantní a tedy

¹Např. když matice $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ obsahuje jediný nenulový prvek, při výběru počtu prvků $n < N^2$ budou s pravděpodobností $p = \frac{N^2 - n}{N^2}$ vybrané prvky samé nuly a rekonstrukce původní matice \mathbf{M} bude zřejmě nemožná.

velmi dobře komprimovatelná. Tato data lze interpretovat několika způsoby, buď je možné sledovat obraz ve vybraném spektrálním pásmu, nebo lze na data pohlížet tak, že každý pixel obrazu nese místo obvyklé informace o jasu celé spektrum, tedy informaci o složení materiálu snímaného v daném místě obrazu.

Uvažíme-li, že snímaný obraz obvykle obsahuje souvislé plochy složené ze stejného materiálu, lze předpokládat, že bude možné obraz aproximovat pomocí jen několika hlavních komponent. Tyto hlavní komponenty pak budou odpovídat spektrům jednotlivých materiálů přítomných na snímku. Za těchto předpokladů si tedy můžeme dovolit pořídit výrazně méně vzorků hyperspektrálního obrazu a rekonstrukce dosáhneme pomocí aproximace s nízkou hodnotí.

Matematicky lze tento problém popsat následovně: Obrazy $\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^{R \times C}$ o rozměrech $R \times C$ px v jednotlivých spektrálních pásmech $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ reorganizujeme do sloupců matice $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{(R \cdot C) \times N}$. Analogicky k problematice řídké reprezentace, obraz nebudeme pořizovat přímo, ale pomocí měřicí matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times (R \cdot C \cdot N)}$ ve tvaru:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{A}_N \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

kde $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{\widehat{m} \times (R \cdot C)}$, $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ je měřicí matice použitá v spektrálním pásmu i a $m = \widehat{m} \cdot N$ je celkový počet změřených vzorků. Měřicí matice pro jednotlivé kanály mohou být shodné [50], lepších výsledků však lze dosáhnout použitím nezávislých měřicích matic pro každý kanál. Vlastnosti matic \mathbf{A}_i jsou podobné jako při řídké reprezentaci, dobrých výsledků lze dosáhnout použitím náhodných matic [22].

Měřením pomocí matice \mathbf{A} získáme vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m = \mathbf{A} \cdot \text{vec}(\mathbf{X})$, kde $\text{vec}(\mathbf{X})$ znamená seřazení řádků matice \mathbf{X} postupně pod sebe do sloupcového vektoru. Rekonstrukce obrazu \mathbf{X} pak znamená řešit následující problém:

$$\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{X}\|_* \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{y} - \mathbf{A} \cdot \text{vec}(\mathbf{X})\|_2 \leq \epsilon, \quad (5.2)$$

kde ϵ je povolená odchylka řešení v ℓ_2 -normě. Hyperspektrální obrazy se však kromě nízké hodnoty vyznačují i řídkostí ve waveletové transformaci, snímky v jednotlivých pásmech jsou totiž hladké. Proto je možné optimalizační problém (5.2) rozšířit o další člen minimalizující řídkost waveletových koeficientů:

$$\min_{\Phi} \|\Phi\|_* + \lambda \|\Phi\|_{2,1} \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{y} - \mathbf{A} \cdot \text{vec}(\mathbf{W}^{-1}\Phi)\|_2 \leq \epsilon, \quad (5.3)$$

kde $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{(R \cdot C) \times (R \cdot C)}$ je matice zvolené 2D waveletové transformace, $\Phi = \mathbf{W}\mathbf{X}$ obsahuje waveletové koeficienty obrazu, λ je tzv. regularizační parametr a $\|\Phi\|_{1,2} = \sum_{i=1}^{R \cdot C} \|\Phi_i\|_2$ je smíšená $\ell_{1,2}$ -norma (součet ℓ_2 -normou řádků matice Φ) [22]. Význam

$\ell_{1,2}$ -normy je v tomto případě následující: Každý řádek matice Φ obsahuje spektrum jednoho obrazového bodu (ve waveletové transformaci), jeho ℓ_2 -norma pak představuje celkovou energii tohoto bodu. Vzhledem k tomu, že řídkost hyperspektrálních obrazů je *sdrúžená* (joint sparsity), tedy že nenulové koeficienty (ve waveletové transformaci) se nacházejí ve všech pásmech přibližně na stejných místech, lze tuto řídkost vyžadovat sdrúženě pro všechna spektrální pásma pomocí ℓ_1 -normy energií pixelů a není třeba uvažovat řídkost v každém pásmu samostatně.

Druhou možností, jak vynutit po částech hladký obraz (a tedy řídký ve waveletové transformaci) je využít minimalizace totální variace (total variation minimization/denoising, TVDN). Tento přístup je poměrně často používán, protože dosahuje lepších výsledků ve srovnání s přístupem založeným na waveletové transformaci [22]. Totální variace dvojrozměrného obrazu je definována jako

$$\|\mathbf{X}_j\|_{\text{TV}} = \sum_u^R \sum_v^C |(\nabla \mathbf{X}_j)_{u,v}|, \quad (5.4)$$

kde $\nabla \mathbf{X}_j$ je gradient obrazu \mathbf{X}_j . Odpovídající optimalizační problém pak bude:

$$\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{X}\|_* + \lambda \sum_{j=1}^N \|\mathbf{X}_j\|_{\text{TV}} \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{y} - \mathbf{A} \cdot \text{vec}(\mathbf{X})\|_2 \leq \epsilon, \quad (5.5)$$

místo $\ell_{1,2}$ -normy je tedy použit součet TV-norem obrazů v jednotlivých spektrálních pásmech [23].

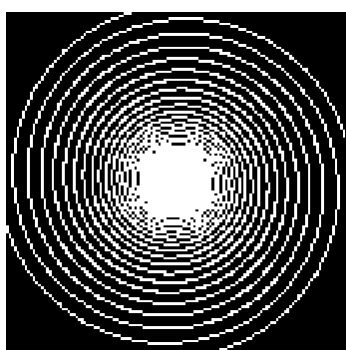
Všechny uvedené optimalizační problémy jsou konvexní, lze je řešit např. algoritmem PPXA (Parallel Proximal Algorithm) [16], jehož výhodou je možnost paralelní implementace. Díky těmto technikám je možné v případě hyperspektrálního zobrazování ušetřit až 97 % dat při dosažení velmi kvalitní rekonstrukce [22, 23].

6 REPREZENTACE SIGNÁLŮ V NMR

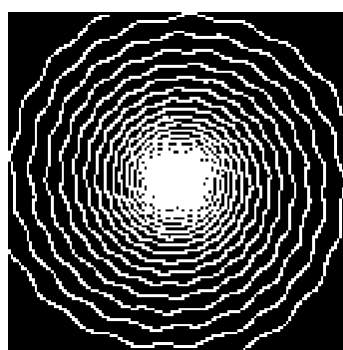
Úvodní kapitoly se velmi podrobně věnovaly fenoménům nukleární magnetické rezonance, řídké reprezentace signálů a aproximace s nízkou hodnotostí. Cílem této práce je využít znalostí z těchto oblastí k navržení lepších metod zpracování signálů z NMR. Nukleární magnetická rezonance je jednou z oblastí, kde je možné řídké reprezentace signálů s výhodou využít, a to především při lékařské diagnostice. V současné době je problémem mnoha metod zejména dlouhá doba měření, pacient je nucen zůstat dlouhou dobu v klidu, což zejména u dětských pacientů může činit problémy. Urychlení snímání může také umožnit sledování dynamických dějů, např. průběhu činnosti srdce v čase.

6.1 Zrychlení MRI

Obrazy z magnetické rezonance vykazují značnou prostorovou korelaci a jsou velmi řídké ve waveletových bázích. Je tedy možné využít komprimovaného snímání a omezit počet měření pouze na nutné minimum. Vzhledem k fyzikální podstatě magnetické rezonance, zvláště pak omezenému výkonu gradientních polí, není možné volit zcela libovolnou trajektorii v k -prostoru [35]. Jako vhodné se jeví především měření v radiálních čarách ve frekvenční oblasti, rychlejší metody pak používají trajektorii ve tvaru spirály (buď s rovnoměrnými rozestupy, nebo s proměnnou hustotou), kterou je možné ještě dodatečně pertubovat (zvlnit). Příklad takových trajektorií je možné vidět na obr. 6.1, experimentálně bylo ověřeno, že při jejich použití je možné úspěšně obraz rekonstruovat. Tyto trajektorie navíc mají lepší průběh



(a) spirální trajektorie



(b) zvlněná spirála

Obr. 6.1: Spirální trajektorie v k -prostoru.

rozptylové funkce¹ (PSF) [34].

Při rekonstrukci dvourozměrného obrazu bylo nutné převést dvourozměrnou úlohu na jednorozměrnou, aby bylo možné využít standardních algoritmů pro řešení úlohy (P0). Díky separabilitě dvojrozměrné diskrétní Fourierovy a waveletové transformace pak je možné úlohu definovat jako

$$\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{X}\|_0 \quad \text{vzhledem k} \quad \mathbf{R} \cdot \text{vec}(\mathbf{\Phi}\mathbf{\Psi}\mathbf{X}\mathbf{\Psi}^T\mathbf{\Phi}^T) = \mathbf{y}, \quad (\text{P0-2D})$$

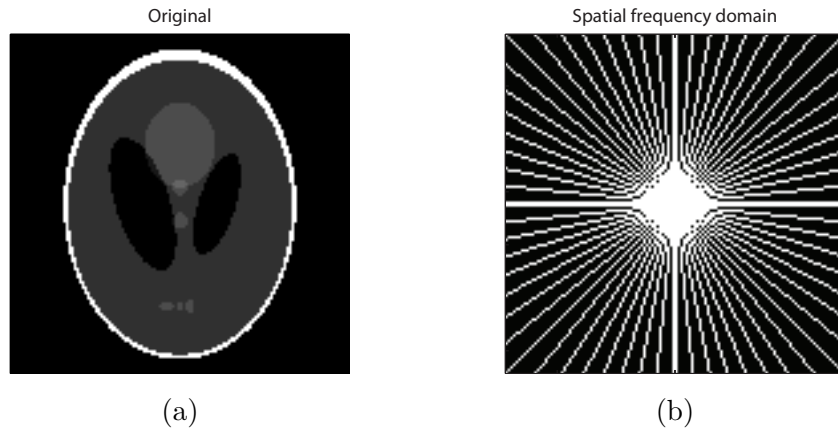
kde operace $\text{vec}(\mathbf{A})$ znamená seřazení sloupců matice \mathbf{A} postupně pod sebe do sloupcového vektoru, a ℓ_0 -norma matice \mathbf{X} je definována analogicky k vektorovému případu. Tento problém je ekvivalentní s jednorozměrným případem:

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{vzhledem k} \quad \mathbf{R}\mathbf{\Omega}\mathbf{x} = \mathbf{y}, \quad (\text{P0-1D})$$

kde $\mathbf{x} = \text{vec}(\mathbf{X})$ a matice $\mathbf{\Omega}$ je určena pomocí Kroneckerova součinu: $\mathbf{\Omega} = (\mathbf{\Phi}\mathbf{\Psi}) \otimes (\mathbf{\Phi}\mathbf{\Psi})$ [20].

Na obr. 6.2a je možné vidět tzv. *Shepp-Loganův fantom* [47], což je uměle vytvořený obraz napodobující řez mozku. Snímání metodou MRI bylo simulováno převedením obrazu do oblasti prostorové frekvence pomocí 2D FFT a zachováním pouze vzorků ležících na 32 radiálních čarách s konstantním úhlovým rozestupem (viz obr. 6.2b). Při této simulaci tedy došlo k podvzorkování obrazu, radiální čáry představují pouze 24,76 % všech vzorků.

Empiricky bylo zjištěno, že Shepp-Loganův fantom je řídký v bázi Haarových waveletů (tj. Daubechies 1), největší řídkosti bylo dosaženo pro hloubku dekompozice $J = 2$.

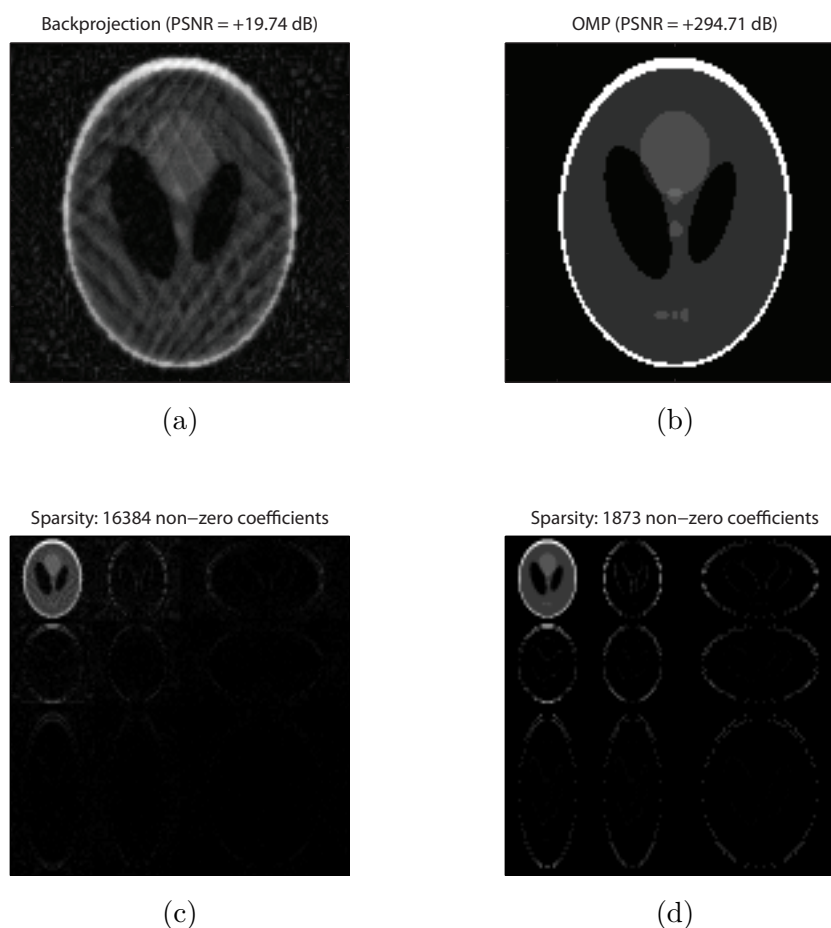


Obr. 6.2: a) Shepp-Loganův fantom a b) 32 radiálních čar ve frekvenční oblasti obsahující nenulové koeficienty.

¹Rozptylová funkce (Point Spread Function) je impulsní odezva zobrazovacího systému. Výsledný obraz je tedy dán konvolucí skutečného obrazu s touto funkcí a proto se snažíme, aby se PSF co nejvíce blížila jednotkovému impulzu.

Při experimentu byla porovnána tradiční metoda filtrované zpětné projekce s metodou komprimovaného snímání, kdy k vyhledání aproximace řešení byl využit algoritmus OMP. Výsledky experimentu jsou vidět na obr. 6.3. Zatímco tradiční metoda dosáhla pouze přibližné rekonstrukce obrazu ($\text{PSNR} = 19,74 \text{ dB}$), pomocí komprimovaného snímání se podařilo obraz obnovit přesně ($\text{PSNR} = 294,71 \text{ dB}$, což odpovídá zaokrouhlovacím chybám při výpočtu).²

Obrázky 6.3c a 6.3d srovnávají výsledné rekonstrukce v Haarově transformaci. Je patrné, že v případě filtrované zpětné projekce je počet nenulových koeficientů $k = 16384$ (což je celkový počet koeficientů), zatímco při použití algoritmu OMP bylo dosaženo řídkosti $k = 1873$. Především je zde však patrné výraznější zastoupení detailních koeficientů, které se podařilo pomocí komprimovaného snímání obnovit.



Obr. 6.3: Rekonstrukce pomocí a) filtrované zpětné projekce, b) algoritmu OMP a c), d) Haarova transformace rekonstrukcí.

²PSNR (Peak Signal-to-Noise Ratio) je objektivní metrika pro měření odlišnosti dvou obrazů.

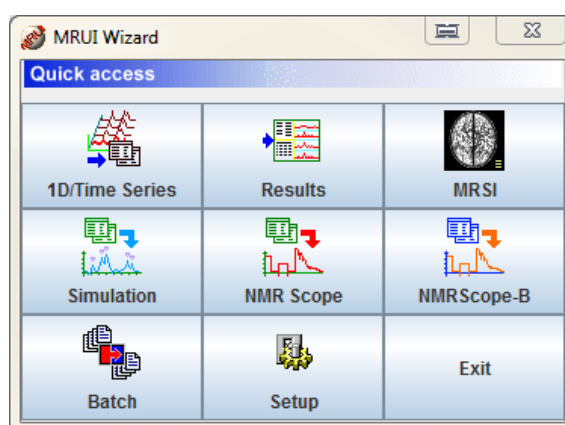
6.2 Využití v MRS a MRSI

Zpracování dat ze spektroskopického zobrazování vyžaduje robustní automatizovaný přístup, který umožní zavedení in vivo spektroskopie do běžné klinické praxe. Jak bylo vysvětleno v kapitole 2.1.5, spektrum v nukleární magnetické rezonanci vzniká rezonancí jader, nejčastěji vodíku ^1H . Vzájemnou magnetickou interakcí jader uvnitř molekuly dochází k posuvu a štěpení spektrálních čar. Výsledné spektrum by při uvažování ideálních vlastností měřicího řetězce (a nekonečných relaxačních časů) bylo velmi řídké, v reálných podmínkách jsou spektrální čáry „rozostřené“. Pokud však uvažujeme spektra jednotlivých látek ve vzorku obsažených za atomy slovníku, lze najít velmi řídkou reprezentaci změřeného spektra.

Pokud navíc používáme metodu spektroskopického zobrazování, je pravděpodobné, že spektra sousedních voxelů jsou korelovaná. Podobně jako v případě MRI, i zde je tedy možné pomocí komprimovaného snímání urychlit sběr dat.

6.2.1 Program jMRUI

Program jMRUI (zkratka pro Magnetic Resonance User Interface) je grafickým rozhraním umožňujícím analyzovat spektroskopická data. Na jeho vývoji, především pak na nástroji NMR Scope-B, se mimo jiné podílí i Ústav přístrojové techniky Akademie věd České republiky. Funkce tohoto programu zahrnují frekvenční filtrování signálů, korekci artefaktů způsobených vířivými proudy, kvantifikaci spekter (např. metody VARPRO, AMARES, HTLS a další) a mnoho dalších. Stěžejní funkcí je simulátor NMR založený na kvantové mechanice, pomocí něž je možné získat spektra libovolných molekul bez nutnosti NMR měření.



Obr. 6.4: Program jMRUI po spuštění zobrazí nabídku nejčastěji používaných funkcí.

Physics: Spin system - Sample - Instrument - Model (NAA.nsp)

Number of coupled spins: 5

Static magnetic field B0 [T]: 1.5

Position: x [mm], y [mm], z [mm]

Nuclei-chemical shifts

No.	Nucleus	Multiplicity	Group	Shifts
1	1H	1	1	4.3817
2	1H	1	1	2.6727
3	1H	1	1	2.4863
4	1H	3	1	2.008
5	1H	1	1	7.8205

J-couplings

	1	2	3	4	5
1	0.0	3.861	9.821	0.0	6.40
2	3.861	0.0	-15.592	0.0	0.0
3	9.821	-15.592	0.0	0.0	0.0
4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
5	6.40	0.0	0.0	0.0	0.0

T1 self- and cross-relaxation rates [1/s]

	1	2	3	4	5
1	0	0	0	0	0
2	0	1	0	0	0
3	0	0	1	0	0
4	0	0	0	1	0
5	0	0	0	0	1

Frequency

No.	Nuclide	Larmor [MHz]	ObsOffset [Hz]	ObsOffset [pp...]	B1 factor
1	1H	63.865797	-0.0	0	1

T2 relaxivity of coherence orders

	0	1	2	3	4	5
{T2}	{T2}	{T2}	{T2}	{T2}	{T2}	{T2}

Observable(s): Fm(1H)

Integration: ☒ Relaxation

Table ID	Values	Dimension	Integration
{x}	-100:10:100	0	<input checked="" type="checkbox"/>
{y}	-100:10:100	1	<input checked="" type="checkbox"/>
{T2}	1:1:30	2	<input type="checkbox"/>

New Save Select Distribution Remove Distribution Edit Distribution

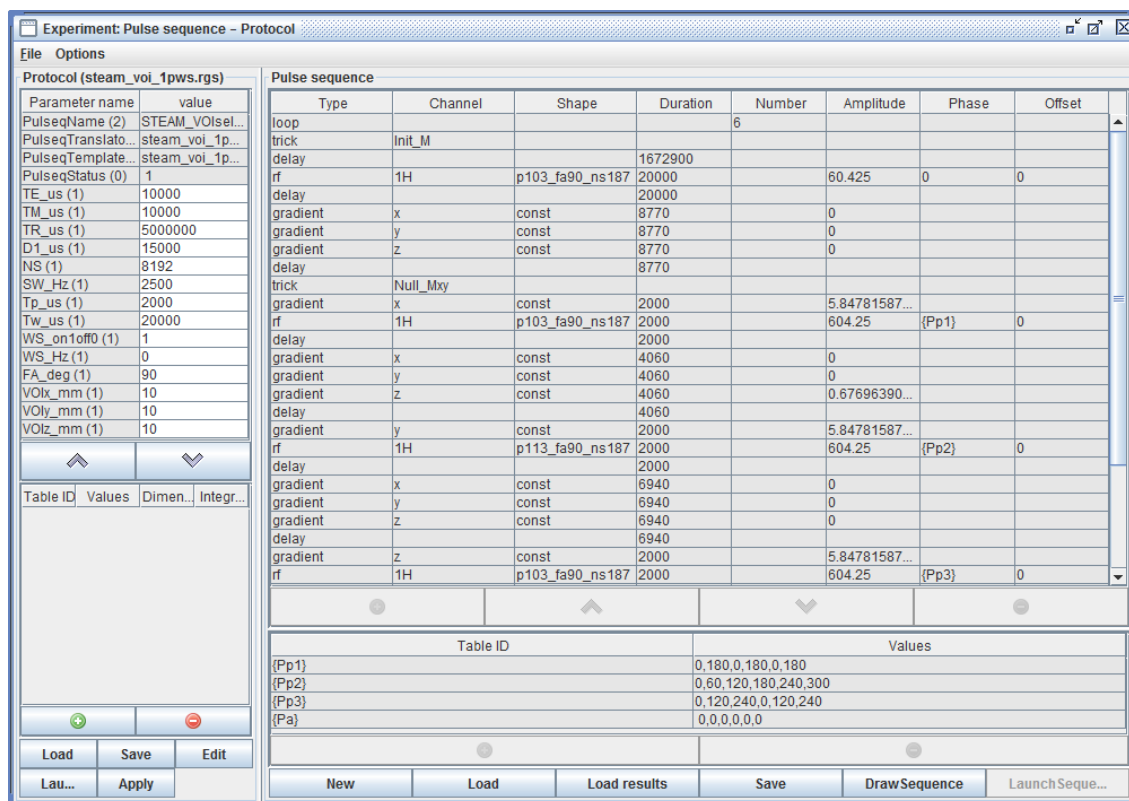
Obr. 6.5: Zadávání vlastností molekuly v programu jMRUI.

Aplikace je napsána v jazycích Java a Python. Po spuštění je zobrazena nabídka nejčastěji používaných funkcí (viz obr. 6.4).

Pro spuštění prostředí simulátoru stačí kliknout na tlačítko „NMR Scope-B“. Rozhraní simulátoru tvoří několik oken, nejprve je nutné zvolit vlastnosti měřeného vzorku v okně „Physics: Spin System - Sample - Instrument - Model“. Obrázek 6.5 zobrazuje toto okno s již načteným předpřipraveným modelem metabolitu NAA.

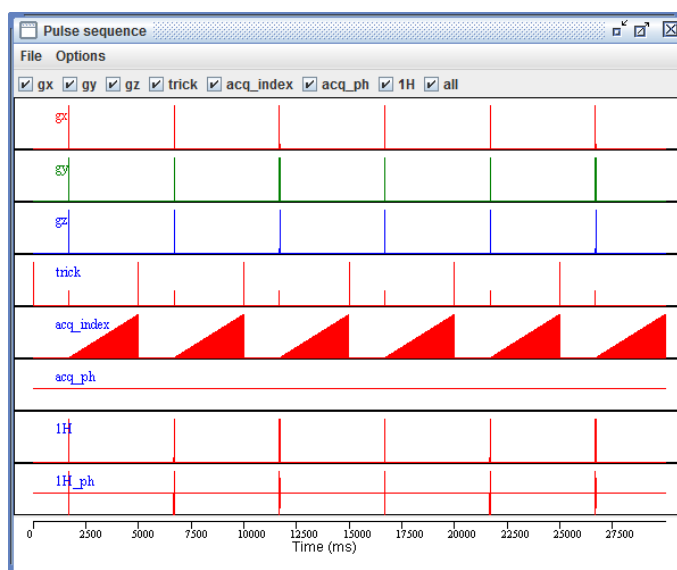
Vlevo nahoře lze zadat parametry atomů dané molekuly (typ jádra, chemický posun apod.), uprostřed je pak tabulka obsahující vzájemné interakční konstanty mezi těmito jádry. V tomto okně je také možné zvolit indukci magnetického pole B_0 a relaxační časy T_2 . Pokud zapíšeme hodnotu libovolného parametru ve tvaru $\{x\}$, můžeme zadat v dolní části okna rovnou celý rozsah hodnot místo jediné hodnoty. Toho lze využít při simulacích, které pracují s prostorovým rozložením spinových systémů. NMR Scope-B provádí simulace pro každou kombinaci hodnot samostatně a následně výsledky těchto simulací sečte (pokud je zvolena vlastnost „Integration“). Definicí $\{x\} = -100 : 10 : 100$, $\{y\} = -100 : 10 : 100$ tedy dojde k simulacím na mřížce 100×100 mm s 10mm rozestupy. Program navíc umožňuje vložit speciální skript napsaný v jazyce Python, který specifikuje distribuci pozorované hmoty v prostoru. Tento skript pro každou souřadnici $[x, y, z]$ vrací lokální hustotu jader.

Po zvolení vlastností měřeného vzorku je nutné nastavit měřící sekvenci. To lze provést v okně *Experiment: Pulse sequence* (viz obr. 6.6). Je možné načíst předpřipravené sekvence nebo vytvořit vlastní sekvenci. Tyto sekvence lze navíc paramet-

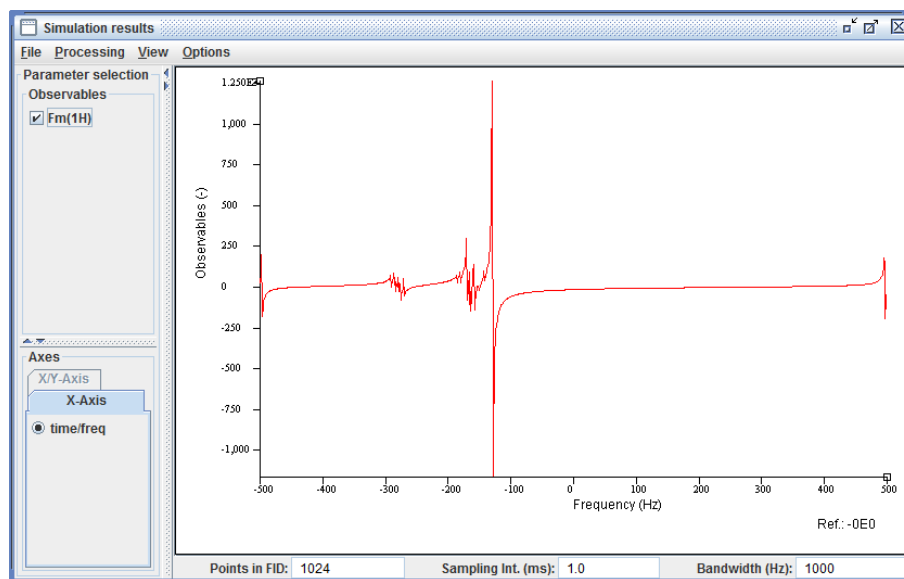


Obr. 6.6: Popis experimentu v programu jMRUI.

rizovat a vytvářet tak generické protokoly. Na obrázku 6.6 je vidět načtený protokol jednovoxelové sekvence STEAM, v levé části okna je pak možné nastavit parametry tohoto protokolu (např. rozměry voxelu).

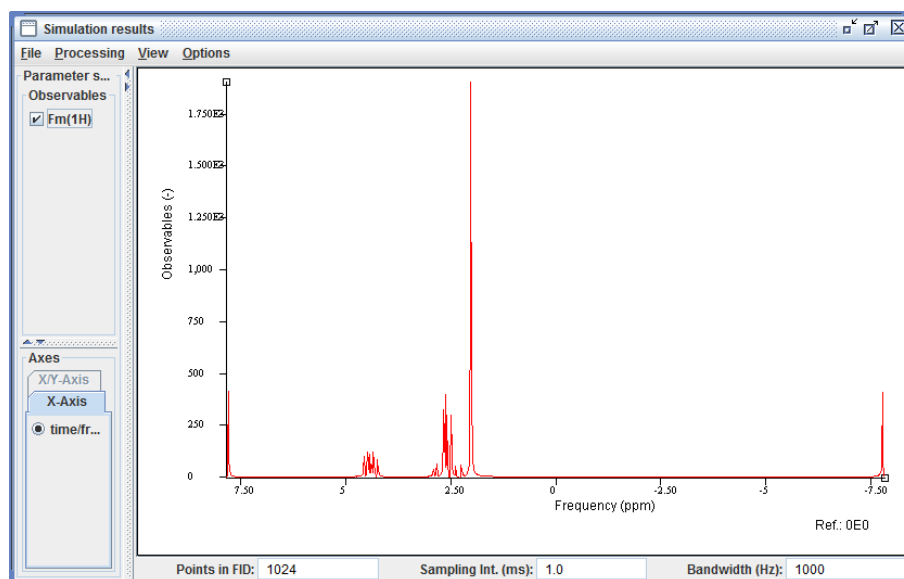


Obr. 6.7: Zobrazení měřicí sekvence v programu jMRUI.



Obr. 6.8: Výsledek simulace v programu jMRUI.

Tlačítkem *Draw Sequence* je možné zobrazit průběh měřicí sekvence v novém okně *Pulse sequence* (viz obr. 6.7). Kliknutím na tlačítko *Launch Protocol* je spuštěna simulace a výsledky jsou zobrazeny v novém okně *Simulation results*. Při použití složitějších protokolů může toto okno obsahovat výsledky více sekvencí. Tyto jsou poté zobrazeny v levé části okna a je možné je zobrazovat samostatně nebo společně. Pomocí nástroje *Processing* → *Phase* lze nastavit správnou fázi signálu (obvykle 90°). V menu *View* lze také zvolit zobrazení reálné, imaginární složky nebo absolutní



Obr. 6.9: Správně korigovaná fáze signálu v programu jMRUI.

hodnoty spektra, dále je možné zobrazit samotný FID. Pod položkou *Options* se pak skrývá nastavení horizontální osy (jednotky v Hz, kHz, ppm).

Výsledek simulace se správně nastavenou fází je na obr. 6.9. Okno *Simulation results* dále nabízí export výsledků simulace do několika formátů, mimo jiné do prostředí MATLAB.

6.2.2 Návrh měřicí sekvence

Simulátoru jMRUI bylo využito pro získání atomů do slovníku použitého pro řídkou reprezentaci spekter. Základní dostupná sekvence STEAM neumožňovala nastavení polohy voxelu, proto jsem navrhl vlastní sekvenci. Popis sekvence je tvořen několika soubory, nejdůležitějším je soubor s příponou *.psq*, který obsahuje definici událostí (RF pulzy, gradienty apod.):

```
# TABLES
{Pp1} [TabPp1]
{Pp2} [TabPp2]
{Pp3} [TabPp3]
{Pa} [TabPa]

# phase cycle of {Pp1} {Pp2} {Pp3} {Pa}
loop [NCycles]
    trick Init_M

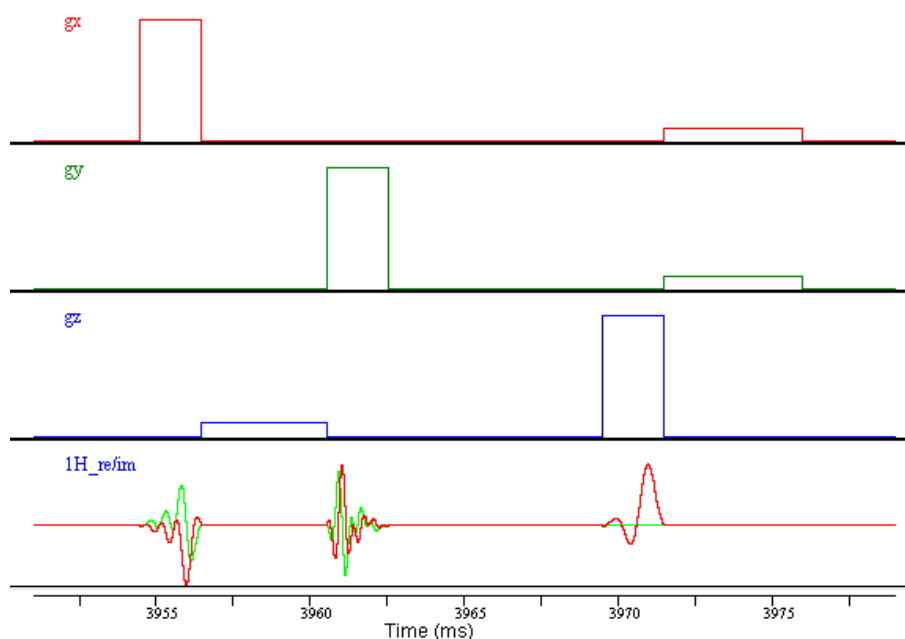
# PREPARATION
delay [D0]

# LOCALIZATION 3D
    gradient x const [Tp1] [Gxp1]
    rf 1H [Mp1] [Tp1] [Ap1] {Pp1} [Fp1]
    delay [Tp1]
        gradient x const [De1] [Gxe1]
        gradient y const [De1] [Gye1]
        gradient z const [De1] [Gze1]
    delay [De1]
        gradient y const [Tp2] [Gyp2]
    rf 1H [Mp2] [Tp2] [Ap2] {Pp2} [Fp2]
    delay [Tp2]
        gradient x const [Dm] [Gxm]
        gradient y const [Dm] [Gym]
        gradient z const [Dm] [Gzm]
    delay [Dm]
        gradient z const [Tp3] [Gzp3]
    rf 1H [Mp3] [Tp3] [Ap3] {Pp3} [Fp3]
    delay [Tp3]
        gradient x const [De2] [Gxe2]
        gradient y const [De2] [Gye2]
        gradient z const [De2] [Gze2]
    delay [De2]
    acquire [dwelltime] [NSamples] 0 {Pa}
    delay [Da]
loop_end
```

Parametry těchto událostí (časování, amplitudy a jiné) jsou označeny názvy a je možné je měnit. Vzhledem ke komplikovanosti nastavení těchto hodnot nejsou tyto hodnoty nastavovány ručně, ale pomocí skriptu v jazyce Python, který na základě několika základních parametrů spočítá veškeré hodnoty potřebné v souboru `.psq`. Např. pro nastavení gradientního pole a RF pulzu pro prostorové zakódování je nutné provést následující výpočty:

```
(NSamples1, FlipAngle1, B1max_T1, Bw_T1, Adiabatic1, Asymmetry1, err1) = ←
    translate.GetPulseProperties(Mp1);
if (len(err1) > 0):
    raise Exception(err1);
Gxp1 = 1e6 * Bw_T1 / Tp1 / VOIx_mm / gamma_MHzIT;    # gradient [mT/m]
Tp1 = Tp;                                             # duration [us]
if (Tp1 > 0):
    Ap1 = 1e6*B1max_T1 / Tp1 * FA_deg / FlipAngle1;  # amplitude
else:
    Ap1 = 0;                                          # pulse off if Tp == 0
Fp1 = -ix * VOIx_mm * Gxp1 * gamma_MHzIT;          # freq offset [Hz]
```

Nejprve jsou zjištěny vlastnosti RF pulzu (počet vzorků, úhel otočení vektoru magnetizace, selektivita pulzu a další), na základě vzorce (2.14) je pak určena velikost gradientu a frekvenční posun RF pulzu. Analogicky jsou spočteny parametry pro dimenze y a z , dále je určeno časování pulzů a parametry korekčních gradientů. Výsledná sekvence pro polohu voxelu $[-1, 2, 0]$ o velikosti $10 \times 10 \times 10$ mm je vidět na obr. 6.10. Nejprve je pomocí gradientu a RF pulzu vybrána vrstva kolmá na osu x , následně y a nakonec z . Je patrné, že RF pulz během gradientu \vec{G}_x se liší od RF



Obr. 6.10: Výsledná sekvence STEAM pro jednovoxelovou spektroskopii.

pulzu během gradientu \vec{G}_z , tento pulz je frekvenčně posunut (modulován komplexní exponenciálou) a tím je dosaženo excitace vrstvy, která neleží v izocentru magnetu. RF pulz během působení gradientu \vec{G}_y je také modulován, zároveň je však symetricky převrácen oproti ostatním pulzům. Po těchto třech pulzech je vybudena pouze oblast zvoleného voxelu (proces výběru voxelu ilustruje obr. 2.23).

6.2.3 Kvantifikace MRS spekter pomocí řídké reprezentace

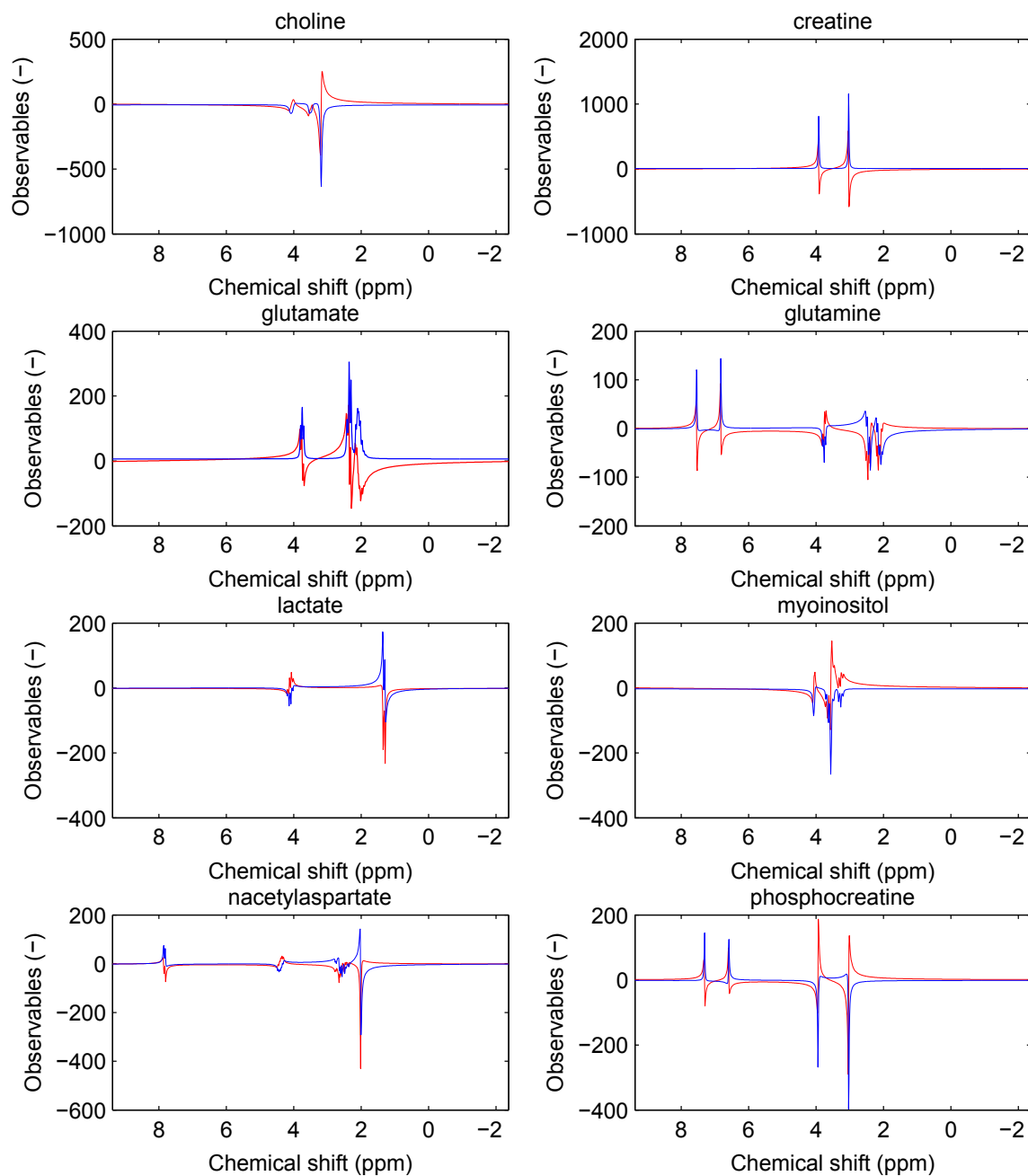
Pomocí programu jMRUI jsem postupně nasimuloval spektra některých metabolitů a pomocí skriptu v prostředí MATLAB (viz příloha A) vytvořil slovník. Každý metabolit byl simulován s několika různými hodnotami relaxačního času T_2 (hodnoty byly zadány ve tvaru $\{T_2\} = 1 : 1 : 30$). Pro simulaci byla zvolena navržená jednovoxelová sekvence, indukce magnetického pole byla $\vec{B}_0 = 3\text{ T}$, šířka spektra 1500 Hz, počet vzorků na FID 1024. Výsledky simulací byly exportovány do formátu MATLAB souboru, který má následující strukturu:

```
DIM=3;
SIZE=[1024,1,30];
DIR=[0,1,2];
TABNAMES={'time/freq','observables','T2'};
DIM_VALUES={0:0.001:1.024},{Fm(1H)},{1.0,2.0,3.0,4.0,5.0,...}};
PARNAMES={'time/freq','observables',{'T2Relaxivity_Hz_0_0','←
T2Relaxivity_Hz_0_1','T2Relaxivity_Hz_0_2'}};
LARMOR_Hz={1.27731594E8};
REF_Hz={-447.060579};
NUCLEUS={'1H'};
DATA=[
-0.005699708220949562    14.704203743913231
0.9138091204053262    14.27649335967909
1.7546465192091638    13.026889182982153
2.4449372940373326    11.029662082013708
2.924344020498131     8.402698493653944
...
];
```

Formát dat exportovaných programem jMRUI je značně nešťastný, neboť všechny výsledky simulace jsou spojeny za sebou do jedné matice obsahující dva sloupce – reálnou a imaginární složku FID. Při vytváření slovníku bylo tedy nutné tato data rozdělit na atomy odpovídající jednotlivým hodnotám T_2 .

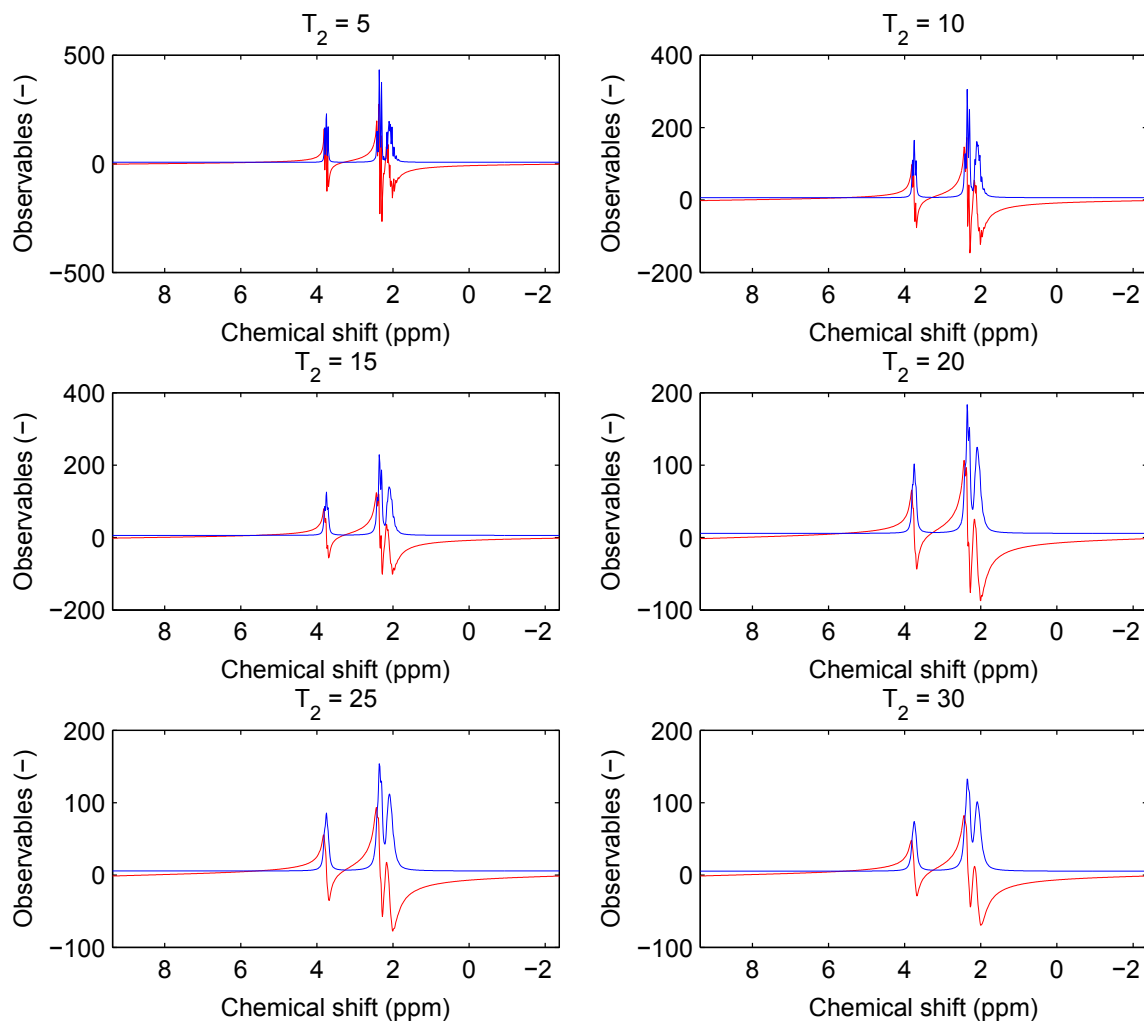
Obrázek 6.11 zobrazuje vybraná spektra metabolitů, zde konkrétně pro $T_2 = 10$. Srovnání spekter pro různá nastavení T_2 nabízí obrázek 6.12. S rostoucí hodnotou T_2 dochází k rozšiřování a snižování spektrálních čar, také klesá celková energie signálu.

Vzhledem k povaze spekter (původně izolované rezonanční frekvence deformované různými vlivy) by se nabízela možnost využití teorie tzv. *super-resolution* (super-rozlišení) [10, 9]. Podle této teorie je možné za určitých předpokladů rekonstruovat signál tvořený izolovanými pulzy deformovaný konvolucí s nějakým jádrem,



Obr. 6.11: Spektra vybraných metabolitů vytvořené simulací v programu jMRUI (červeně reálná složka, modře imaginární).

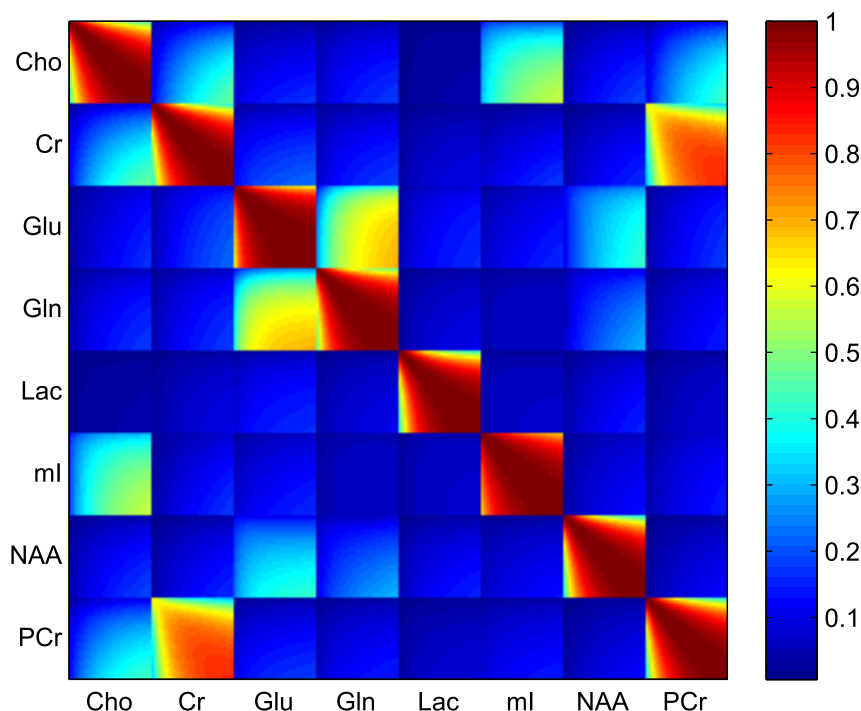
v zásadě tvořícím dolní propust. Takovýto charakter má řada reálných snímačů (např. obrazových). Pokud byly pulzy v původním signálu od sebe dostatečně vzdáleny, je dle této teorie možné dekonvolucí získat z poškozeného signálu původní signál. Při kvantifikaci MRS spekter by tedy tímto postupem nejprve byly zjištěny všechny jednotlivé rezonanční frekvence a teprve následně by se provedla kvantifikace, tedy zjištění, které metabolity jsou ve spektru přítomny a v jakém množství.



Obr. 6.12: Srovnání spekter metabolitu glutamátu pro různé hodnoty relaxačního času T_2 (červeně reálná složka, modře imaginární).

Při pohledu na obr. 6.12 je však patrné, že pro vyšší hodnoty relaxačního času T_2 sousední spektrální čáry zcela splývají, multiplety se překrývají a dekonvoluce takového signálu se stává nereálnou. Reálné spektrum obsahuje více metabolitů, jejichž spektra se navzájem překrývají, měření je navíc zatíženo šumem. Proto je tento způsob kvantifikace MRS spekter nevhodný.

Vhodnější variantou je využití simulací jednotlivých metabolitů jako atomů slovníku a rekonstrukce pomocí algoritmů pro hledání řídkých reprezentací. K tomu účelu jsem navrhnul algoritmus založený na principech algoritmu OMP a využívající specifika této úlohy. Jak bude ukázáno dále, je důležité (stejně jako při použití OMP), aby všechny atomy slovníku byly normalizované. Normalizační koeficienty je vhodné uložit pro finální fázi kvantifikace, kdy k nalezené reprezentaci signálu ve vytvořeném slovníku hledáme skutečné množství jednotlivých metabolitů obsažených ve zkoumaném vzorku. Každá simulace totiž odpovídá jednotkovému množství



Obr. 6.13: Grammova matice vytvořeného slovníku.

metabolitu, energie získaných signálů se však značně liší.

Vytvořený slovník rozhodně není ortogonální, jak je vidět z Grammovy matice na obr. 6.13. Je zřejmé, že atomy tvořené stejným metabolitem s různým excitačním časem T_2 jsou velmi podobné a proto mají navzájem vysoký skalární součin. To odpovídá červeným místům podél diagonály Grammovy matice. Cílem kvantifikace však není stanovení excitačních časů, proto záměna atomů patřících ke stejnému metabolitu nemusí působit velký problém. Je však vidět, že i některé dvojice různých metabolitů jsou sobě podobné, např. glutamát a glutamin nebo kreatin a fosfokreatin. Tato situace je ostatně zřejmá i při pohledu na spektra těchto metabolitů na obr. 6.11. V praxi se často nedaří spektra těchto dvojic od sebe oddělit a proto se udává společná hodnota Glu+Gln resp. Cr+PCr.

Navržený algoritmus MRSMP (MRS Matching Pursuit) využívá struktury vytvořeného slovníku k nalezení řídké aproximace signálu (viz algoritmus 1). Vstupem algoritmu je slovník \mathbf{D} složený z $M \cdot N$ atomů (N pro každý metabolit), signál \mathbf{y} určený ke kvantifikaci, počet metabolitů M a počet atomů na metabolit N . Princip je podobný algoritmu OMP, na začátku je inicializováno reziduum \mathbf{r} jako vstupní signál, nosič \mathbf{s} je prázdný a jsou vybrány všechny atomy (vektor \mathbf{a}). V cyklu čítajícím M iterací je vždy nalezen atom, který má vůči reziduu největší absolutní hodnotu skalárního součinu. Přitom jsou brány v úvahu pouze ty sloupce, které jsou obsaženy ve vektoru \mathbf{a} . Index nalezeného atomu je přidán do nosiče a je aktualizováno

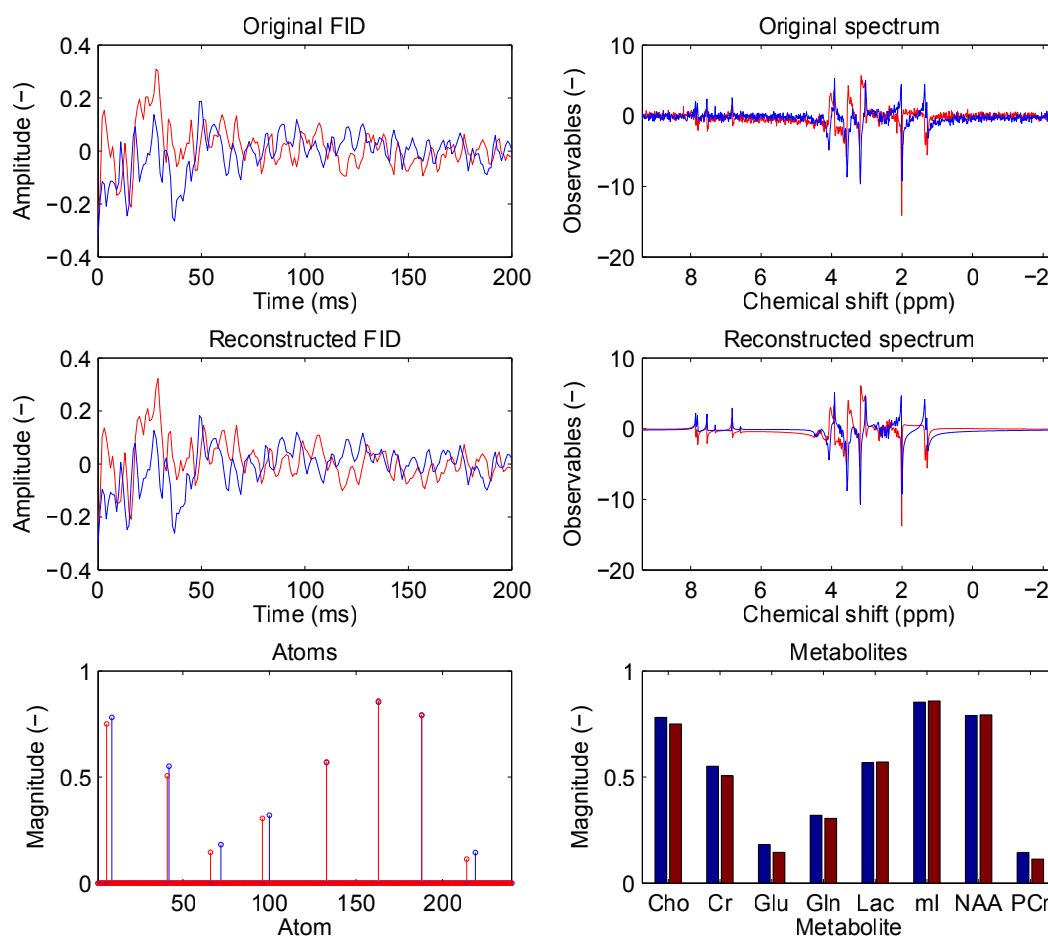
Algoritmus 1 MRSMP (MRS Matching Pursuit).

```
1: function MRSMP( $\mathbf{D}, \mathbf{y}, M, N$ )
2:    $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{y}$  ▷ inicializace rezidua
3:    $\mathbf{s} \leftarrow []$  ▷ inicializace nosiče
4:    $\mathbf{a} \leftarrow [1, 2, \dots, M \cdot N]$  ▷ inicializace výběru atomů
5:   for  $i = 1 \rightarrow M$  do
6:      $p \leftarrow \underset{0 < j < |\mathbf{a}|}{\operatorname{argmax}} |\mathbf{D}_{\mathbf{a}_j}^\top \mathbf{r}|$  ▷ výběr atomu
7:      $\mathbf{s} \leftarrow \operatorname{sort}([\mathbf{s}, \mathbf{a}_p])$  ▷ aktualizace nosiče
8:      $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{y} - \mathbf{D}_\mathbf{s} \mathbf{D}_\mathbf{s}^+ \mathbf{y}$  ▷ aktualizace rezidua
9:      $z \leftarrow \left\lceil \frac{p}{N} \right\rceil$  ▷ identifikace metabolitu
10:     $\mathbf{a} \leftarrow [\mathbf{a}_j, j \notin \{(z-1) \cdot N + 1, \dots, z \cdot N\}]$  ▷ aktualizace výběru atomů
11:  end for
12:   $\mathbf{x} \leftarrow [0, \dots, 0]$ 
13:   $\mathbf{x}_\mathbf{s} \leftarrow \mathbf{D}_\mathbf{s} \mathbf{y}$  ▷ výsledný signál
14:   $\mathbf{m} \leftarrow |\mathbf{x}_\mathbf{s}|$  ▷ nalezené metabolity
15:  return  $\mathbf{x}, \mathbf{m}$ 
16: end function
```

reziduum jako rozdíl vstupního signálu a projekce aktuálního řešení ve slovníku. Na konci každé iterace jsou z vektoru \mathbf{a} odstraněny indexy všech atomů aktuálně identifikovaného metabolitu. Výsledkem algoritmu je rekonstruovaný signál \mathbf{x} a vektor \mathbf{m} obsahující množství jednotlivých metabolitů nalezených ve vstupním signálu.

Příklad činnosti algoritmu MRSMP je vidět na obr. 6.14. Vstupní signál byl vygenerován náhodným výběrem atomů každého metabolitu a nastavením náhodných koeficientů. K signálu byl následně přidán Gaussovský šum o intenzitě $\sigma = 0,01$ (poměr signálu k šumu byl 5,66 dB). Po rekonstrukci algoritmem MRSMP je signál viditelně bez šumu, což je pochopitelné, protože slovník neobsahuje atomy, které by tento šum mohly modelovat. Je patrné, že ne vždy je vybrán atom s přesně stejným relaxačním časem T_2 jako v původním signálu, to je způsobeno vysokou korelací atomů příslušejících k jednomu metabolitu.

Sloupcový graf na obr. 6.14 ukazuje skutečné zastoupení metabolitů v signálu a rekonstruované hodnoty, které nejsou příliš odlišné od skutečných hodnot. Mírně nižší detekované hodnoty jsou způsobeny především nepřesnou identifikací atomu (relaxačního času T_2), při výběru nesprávného atomu skalární součet se skutečně obsaženým atomem klesá s rozdílem relaxačních časů. Z výsledků je však patrná úspěšnost, s kterou jsou rozlišeny podobné metabolity – glutamin a glutamát, resp. kreatin a fosfokreatin.

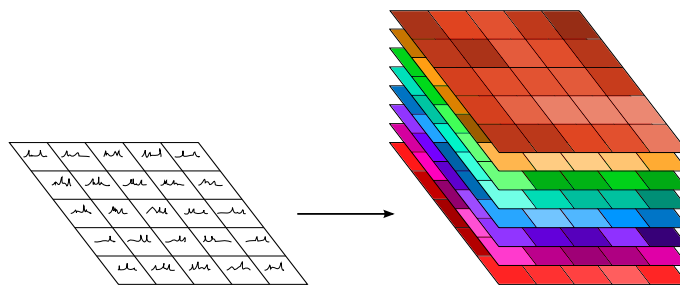


Obr. 6.14: Kvantifikace MRS spekter pomocí algoritmu MRSMP.

Robustnost algoritmu byla ověřena na náhodně generovaných signálech poškozených různou úrovní širokopásmového šumu, výsledná přesnost kvantifikace byla zcela nezávislá na intenzitě širokopásmového šumu. Algoritmus zároveň vykazuje dobrou odolnost vůči úzkopásmovému šumu a fázovému posunu.

6.2.4 Kvantifikace prostorově lokalizovaných spekter

Při zpracování dat z MRSI potřebujeme zpracovat spektra různých voxelů a získat tak sadu dvojrozměrných obrazů reprezentujících výskyt jednotlivých metabolitů v prostoru (viz obr. 6.15). Spektra pocházející z různých voxelů nejsou identická, působením gradientních polí dochází k fázovému posunu oproti středovému voxelu. Vzhledem k principu algoritmu MRSMP však není nutné slovník pro jednotlivé pozice voxelů upravovat, neboť fázový posun signálu je zachycen fází komplexního



Obr. 6.15: Vizualizace zpracování MRSI spekter.

koeficientu výsledného vektoru. Je tak možné použít stejný slovník pro všechny pozice voxelů.

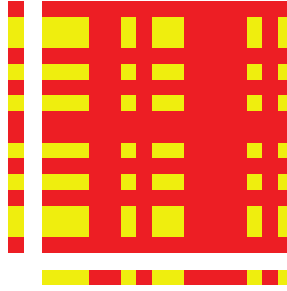
6.2.5 Komprimované snímání v MRSI

Fyzikální princip nukleární magnetické rezonance tvoří nepřekonatelné omezující podmínky pro konstrukci měřících sekvencí a tím omezuje možnosti využití komprimovaného snímání. Přesto však lze nalézt takové postupy, které umožní modifikovat schéma získávání spektroskopických dat tak, aby bylo možné komprimovaného snímání alespoň omezeně využít.

Klíčem k použití komprimovaného snímání v MRSI je konstrukce měřící matice **A**. V sekci 4.3.2 byly diskutovány různé typy běžně používaných měřících matic, zejména náhodné matice (Gaussovske a Bernoullijske). Z podstaty jednovoxelové spektroskopie je zřejmé, že takto navržené matice nelze v MRSI použít, neboť není možné nezávisle excitovat libovolné kombinace voxelů.

Z tohoto důvodu jsem navrhl vlastní schéma komprimovaného snímání vycházející především z principu fungování jednovoxelových (SVS) měřících sekvencí (STE-AM, PRESS). Jak bylo uvedeno v části 2.3.4, prostorově lokalizované spektrum je u SVS získáno postupnou excitací omezených oblastí ve třech dimenzích (x , y , z). Toho je docíleno použitím gradientního pole a frekvenčně lokalizovaného (úzkopásmového) RF pulzu. Základním požadavkem pak je co nejlepší prostorová lokalizace, tedy co nejostřejší vymezení hranic voxelů. Tento požadavek je pak v příkrém rozporu s požadavkem na krátké trvání RF pulzu.

Zobecněním principu výběru voxelů postupnou excitací vrstev v dimenzích x , y a z jsem došel ke schématu použitelnému pro komprimované snímání. Nahrazením úzkopásmového RF pulzu speciálním pulzem, který se ve frekvenční oblasti skládá z několika původních úzkopásmových pulzů patřičně frekvenčně posunutých, lze vybudit zároveň hned několik vrstev. Situaci ilustruje obr. 6.16, nejprve je provedeno vybudění několika vrstev pomocí RF pulzu a gradientu ve směru x , následuje stejný proces pro směr y a z (v tomto 2D případě je RF pulz ve směru z standardní úzko-



Obr. 6.16: Princip vytváření náhodné excitační masky v MRSI.

pásmový pulz). Výsledkem je současná excitace více voxelů, které však nepokrývají mřížku voxelů zcela náhodně, vykazují jistou pravidelnost. Působením gradientních polí dochází k fázovému posuvu signálů v jednotlivých voxelech. S tím je třeba počítat při konstrukci měřicí matice, která tento fázový posun musí kompenzovat. Konstrukci excitační masky $\mathbf{M} \in \{0, e^{i\varphi}\}^{R \times C}$ lze matematicky popsat jako vnější součin náhodných vektorů $\mathbf{x} \in \{0, e^{i\varphi}\}^R$ a $\mathbf{y} \in \{0, e^{i\varphi}\}^C$, tedy $\mathbf{M} = \mathbf{y}\mathbf{x}^\top$. Prvky těchto vektorů jsou buď nulové, nebo obsahují číslo $e^{i\varphi}$, kde φ je úhel odpovídající fázovému posunutí v dané souřadnici.

Měřicí matici $\mathbf{A} \in \{0, e^{i\varphi}\}^{m \times (R \cdot C)}$, $m \leq R \cdot C$, je pak možné zkonstruovat náhodným generováním masek \mathbf{M}_i a uspořádáním těchto masek do řádků matice \mathbf{A} . Příklad takové měřicí matice je možné vidět na obr. 6.17.

Charakter spektroskopických dat vykazuje značnou podobnost s hyperspektrálním zobrazováním. Zaměřil jsem se tedy na rozdíly a fyzikálně daná omezení, abych mohl využít již vyvinutých a vyzkoušených metod z oblasti HSI také v MRSI. Ačkoli analýza a vizualizace MRS dat probíhá obvykle ve frekvenční oblasti, nic nebrání přímému využití FID v časové oblasti. V dalším textu se omezím na 2D případ, rozšíření do třetí dimenze je pak triviální. Oproti značení v sekci 5.3 budu pozorovaná data značit primárně podle složky FID, tedy FID voxelu na pozici $[x, y]$ bude



Obr. 6.17: Příklad měřicí matice komprimovaného snímání v MRSI.

značeno $\mathbf{X}_{x,y} \in \mathbb{C}^N$, kde N je počet vzorků FID. Celý soubor dat tvořený FID všech voxelů pak bude matice $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{(R \cdot C) \times N}$, kde $R \times C$ jsou rozměry mřížky voxelů. Řádky této matice jsou naplněny vektory $\mathbf{X}_{x,y}$ všech voxelů.

Oproti hyperspektrálnímu zobrazování, kde je možné pro každé spektrální pásmo použít nezávislou měřicí matici, v případě MRSI zřejmě použití nezávislé měřicí matice pro jednotlivé vzorky FID možné není. Tvar celkové měřicí matice $\widehat{\mathbf{A}} \in \{0, e^{i\varphi}\}^{(m \cdot N) \times (R \cdot C \cdot N)}$ tedy bude:

$$\widehat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{A} \end{pmatrix}. \quad (6.1)$$

Provedením m měření pomocí matice $\widehat{\mathbf{A}}$ získáme vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^{m \cdot N} = \widehat{\mathbf{A}} \cdot \text{vec}(\mathbf{X})$, kde $\text{vec}(\mathbf{X})$ znamená seřazení řádků matice \mathbf{X} postupně pod sebe do sloupcového vektoru.

Dále jsem se zaměřil na předpoklady nutné k úspěšnému využití rekonstrukčních metod diskutovaných v sekci věnované HSI. Prvním předpokladem je malý počet hlavních komponent. V případě MRSI je zřejmé, že jednotlivá spektra jsou silně korelovaná a počet hlavních komponent bude úzce souviset s počtem různých metabolitů ve spektru obsažených. Tento počet je přibližně v řádu desítek, což ve srovnání s počtem vzorků FID (obvykle 1024 a více) dává velkou naději na přesnou aproximaci s nízkou hodnotí:

$$\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{X}\|_* \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{y} - \widehat{\mathbf{A}} \cdot \text{vec}(\mathbf{X})\|_2 \leq \epsilon. \quad (6.2)$$

Složitější situace oproti HSI nastává při využití prostorové korelace dat, neboť podobnost n -tého vzorku FID mezi sousedními voxely není tak jednoznačná jako podobnost pixelů obrazu HSI ve zvoleném pásmu. Z tohoto důvodu je vhodnější posuzovat prostorovou korelaci ve frekvenční oblasti:

$$\min_{\Psi} \|\Psi\|_* + \lambda \|\Psi\|_{2,1} \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{y} - \widehat{\mathbf{A}} \cdot \text{vec}(\mathbf{F}^{-1} \mathbf{W}^{-1} \Psi)\|_2 \leq \epsilon, \quad (6.3)$$

kde $\mathbf{F} \in \mathbb{C}^{(R \cdot C) \times (R \cdot C)}$ je matice diskretní Fourierovy transformace a $\Psi = \mathbf{W} \mathbf{F} \mathbf{X}$ obsahuje spektrální koeficienty obrazu. Analogicky s HSI je pak využít i minimalizace totální variace, opět ve frekvenční oblasti:

$$\min_{\Pi} \|\Pi\|_* + \lambda \sum_{j=1}^N \|\Pi_j\|_{\text{TV}} \quad \text{vzhledem k} \quad \|\mathbf{y} - \widehat{\mathbf{A}} \cdot \text{vec}(\mathbf{F}^{-1} \mathbf{X})\|_2 \leq \epsilon, \quad (6.4)$$

kde $\Pi = \mathbf{F} \mathbf{X}$ je matice spektrálních koeficientů a Π_j značí j -tý řádek matice Π .

Navržená schémata komprimovaného snímání v MRSI využívají jak aproximace s nízkou hodnotí, tak řídkosti dat. Uvedené problémy lze řešit metodami konvexní optimalizace, vhodné je zejména použití algoritmu PPXA, neboť povaha problémů je velmi podobná komprimovanému snímání v hyperspektrálním zobrazování, kde je tato metoda úspěšně používána. Po provedení rekonstrukce spekter (nebo FIDů) ve všech voxelech následuje fáze kvantifikace popsaná v sekcích 6.2.3 a 6.2.4.

Implementace navržených optimalizačních problémů již časově i znalostně přesahuje rozsah této práce, k jejich úspěšnému řešení je potřeba hlubokých matematických znalostí z oblasti teorie optimalizace. Hotovou implementaci algoritmu PPXA však nabízí např. knihovna UNLocBoX, která je velmi flexibilní a umožňuje řešit všechny v této části navržené optimalizační problémy velmi efektivně [16].

Vzhledem k omezené funkčnosti simulátoru jMRUI v době psaní této práce (neefektivita výpočtů způsobila nepoužitelnost simulátoru pro úlohy většího rozsahu) nebylo možné navržená schémata ověřit na simulovaných datech. Reálná data rovněž nebyla v době psaní práce dostupná. Na základě výsledků publikovaných v oblasti hyperspektrálního zobrazování je však zejména aproximace s nízkou hodnotí slibným přístupem, který je možné v MRSI aplikovat a snížit tak nutný počet měření a tím i celkovou dobu měření. Kvůli některým fyzikálním omezením (např. tvar měřicí matice) je však nutné počítat s horšími výsledky než v případě hyperspektrálního zobrazování.

7 ZÁVĚR

Pokročilé metody založené na nukleární magnetické rezonanci, jako je spektroskopické zobrazování (MRSI), hrají čím dál větší roli v medicínské diagnostice. Většímu rozšíření však brání dlouhá doba měření, nízké rozlišení a složité zpracování získaných dat.

Tato práce se zabývá principem zobrazovacích technik na principu NMR, konvenčními metodami zpracování signálů z NMR a jejich nedostatky. Dále uvádí nový fenomén řídké reprezentace signálů, jeho teoretické pozadí a používané algoritmy. Krátce je také zmíněna příbuzná oblast aproximace s nízkou hodnotí a její aplikace v hyperspektrálním zobrazování (HSI). Cílem práce je ukázat možnosti využití řídké reprezentace signálů a aproximace s nízkou hodnotí pro řešení uvedených nedostatků konvenčních přístupů.

Výhoda řídké reprezentace signálů je demonstrována na rekonstrukci obrazu MRI z malého počtu změřených vzorků. Práce dále navrhuje algoritmus MRSMP určený ke kvantifikaci NMR spekter a experimentálně ověřuje vhodnost takového řešení. Stejný princip je pak použit i pro kvantifikaci prostorově lokalizovaných spekter získaných pomocí spektroskopického zobrazování (MRSI).

V neposlední řadě se práce zabývá návrhem schématu pro získávání dat v MRSI založeném na komprimovaném snímání. Princip schématu je inspirován komprimovaným snímáním v HSI. Je zde využito jak řídké reprezentace dat, tak i aproximace s nízkou hodnotí. S ohledem na fyzikální limity magnetické rezonance je navržen postup získávání dat pomocí speciální měřicí sekvence.

Některé výsledky práce byly publikovány v elektronickém časopise Elektrotechnika vydávaném na Fakultě elektrotechniky a komunikačních technologií. Úvod do problematiky řídké reprezentace signálů je možné nalézt v článku [30], navazující článek [29] se zabývá komprimovaným snímáním.

LITERATURA

- [1] Abdi, H.; Williams, L. J.: Principal component analysis. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, ročník 2, 2010: str. 433–459.
- [2] Bernstein, M. A.; King, K. F.; Zhou, X. J.: *Handbook of MRI Pulse Sequences*. Elsevier Academic Press, 2004, ISBN 0120928613.
- [3] Bogner, W.; Gruber, S.; Trattnig, S.; aj.: High-resolution mapping of human brain metabolites by free induction decay ^1H MRSI at 7T. *NMR in Biomedicine*, ročník 25, č. 6, 2012: str. 873–882.
- [4] Boyd, S.; Vandenberghe, L.: *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004, ISBN 0521833787.
- [5] Bruckstein, A. M.; Donoho, D. L.; Elad, M.: From Sparse Solutions of Systems of Equations to Sparse Modeling of Signals and Images. *SIAM Review*, ročník 51, č. 1, 2009: s. 34–81, ISSN 0036-1445.
- [6] Burget, L.; Černocký, J.: Klasifikace a rozpoznávání. 2013.
URL <https://www.fit.vutbr.cz/study/courses/IKR/public/>
- [7] Candes, E.; Recht, B.: Exact Matrix Completion via Convex Optimization. *Foundations of Computational Mathematics*, ročník 9, č. 6, 2009: s. 717–772, ISSN 1615-3375, doi:10.1007/s10208-009-9045-5.
URL <http://dx.doi.org/10.1007/s10208-009-9045-5>
- [8] Candes, E.; Romberg, J.: Sparsity and incoherence in compressive sampling. *Inverse Problems*, ročník 23, 2006: s. 969–985.
- [9] Candes, E. J.; Fernandez-Granda, C.: Super-Resolution from Noisy Data. *CoRR*, ročník abs/1211.0290, 2012.
- [10] Candes, E. J.; Fernandez-Granda, C.: Towards a Mathematical Theory of Super-Resolution. *CoRR*, ročník abs/1203.5871, 2012.
- [11] Candes, E. J.; Tao, T.: Decoding by Linear Programming. *IEEE Transactions on Information Theory*, ročník 51, 2005: s. 4203–4215.
- [12] Candes, E. J.; Wakin, M. B.: An introduction to compressive sampling. *IEEE Signal Processing Magazine*, ročník 25, č. 2, 2008: s. 21–30, ISSN 1053-5888.
- [13] Chen, S.; Donoho, D.; Saunders, M.: *Atomic decomposition by basis pursuit*. SIAM J. Sci Comput. 20 (1998), no.1, reprinted in SIAM Review, 2001.

- [14] Christensen, O.: *Frames and Bases, An Introductory Course*. Boston: Birkhäuser, 2008, ISBN 9780817646776.
- [15] Cohen, A.; Dahmen, W.; DeVore, R.: Compressed sensing and best k -term approximation. *Journal of The American Mathematical Society*, ročník 22, 2009: s. 211–231.
- [16] Combettes, P. L.; Pesquet, J.-C.: Proximal Splitting Methods in Signal Processing. In *Fixed-Point Algorithms for Inverse Problems in Science and Engineering*, editace H. H. Bauschke; R. S. Burachik; P. L. Combettes; V. Elser; D. R. Luke; H. Wolkowicz, Springer Optimization and Its Applications, Springer New York, 2011, ISBN 978-1-4419-9568-1, s. 185–212, doi:10.1007/978-1-4419-9569-8_10.
URL http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4419-9569-8_10
- [17] Donoho, D. L.; Elad, M.: Optimally sparse representation in general (nonorthogonal) dictionaries via l_1 minimization. *Proceedings of The National Academy of Sciences*, ročník 100, č. 5, 2003: s. 2197–2202.
- [18] Duarte, M.; Davenport, M.; Takhar, D.; aj.: Single-Pixel Imaging via Compressive Sampling. *IEEE Signal Processing Magazine*, ročník 25, č. 2, 2008: s. 83–91, ISSN 1053-5888.
- [19] Elad, M.: *Sparse and Redundant Representations: From Theory to Applications in Signal and Image Processing*. Springer, 2010, ISBN 9781441970107.
- [20] Fang, Y.: Sparse Matrix Recovery from Random Samples via 2D Orthogonal Matching Pursuit. *CoRR*, ročník abs/1101.5755, 2011.
- [21] Fornasier, M.; Rauhut, H.: *Handbook of Mathematical Methods in Imaging*, kapitola Compressive Sensing. Springer, 2011, ISBN 978-0-387-92920-0.
- [22] Golbabaee, M.; Vandergheynst, P.: Hyperspectral image compressed sensing via low-rank and joint-sparse matrix recovery. In *IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2012)*, 2012, s. 2741–2744.
- [23] Golbabaee, M.; Vandergheynst, P.: Joint Trace/TV Minimization: A New Efficient Approach for Spectral Compressive Imaging. In *IEEE International Conference on Image Processing (ICIP 2012)*, 2012.
- [24] Gonzalez, R. C.; Woods, R. E.: *Digital Image Processing*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., třetí vydání, 2001, ISBN 0201180758.

- [25] Gorodnitsky, I. F.; Rao, B. D.: Sparse signal reconstruction from limited data using FOCUSS: A re-weighted minimum norm algorithm. *IEEE Transactions on Signal Processing*, ročník 45, č. 3, 1997: s. 600–616.
- [26] Gribonval, R.; Nielsen, M.: Sparse representations in unions of bases. *IEEE Transactions on Information Theory*, ročník 49, 2003: s. 3320–3325.
- [27] Halliday, D.; Resnick, R.; Walker, J.: *Fundamentals of Physics*. Wiley, 9 vydání, 2010.
- [28] Henzlová, P.: *Přehled metod komprimovaného snímání*. Bakalářská práce, ČVUT, 2010.
- [29] Hrbáček, R.; Rajmic, P.; Veselý, V.; aj.: Řídké reprezentace signálů: komprimované snímání. *Elektrorevue – Internetový časopis*, 2011: s. 1–8.
URL <http://www.elektrorevue.cz/files/200000809-6b46f6c40f>
- [30] Hrbáček, R.; Rajmic, P.; Veselý, V.; aj.: Řídké reprezentace signálů: úvod do problematiky. *Elektrorevue – Internetový časopis*, 2011: s. 1–10.
URL <http://www.elektrorevue.cz/files/200000751-638ac6484b>
- [31] Jackson, A.; Sheppard, S.; Johnson, A. C.; aj.: Combined fat- and water-suppressed MR imaging of orbital tumors. *American journal of neuroradiology*, ročník 20, 1999: s. 1963–9, ISSN 0195-6108.
- [32] Karahanoglu, N. B.; Erdogan, H.: A* Orthogonal Matching Pursuit: Best-First Search for Compressed Sensing Signal Recovery. *Elsevier Digital Signal Processing*, 2011.
- [33] Keeler, J.: *Understanding NMR Spectroscopy*. University of Cambridge, Department of Chemistry, 2004.
- [34] Lustig, M.; Donoho, D.; Santos, J.; aj.: Compressed Sensing MRI. *IEEE Signal Processing Magazine*, ročník 25, č. 2, 2008: s. 72–82, ISSN 1053-5888.
- [35] Lustig, M.; Kim, S.; Pauly, J.: A Fast Method for Designing Time-Optimal Gradient Waveforms for Arbitrary k -Space Trajectories. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, ročník 27, č. 6, 2008: s. 866–873, ISSN 0278-0062.
- [36] Mallat, S.; Zhang, Z.: Matching pursuits with time-frequency dictionaries. *IEEE Transactions on Signal Processing*, ročník 41, č. 12, 1993: s. 3397–3415, ISSN 1053-587X.

- [37] Šárka Mierisová; Ala-Korpela, M.: MR Spectroscopic Quantitation: a Review of Frequency-Domain Methods. In *NMR in Biomedicine*, ročník 14, 2001, s. 247–259.
- [38] Nahodilová, J.: *Zpracování magneticko-rezonančních spektroskopických dat pomocí LCModelu*. Diplomová práce, Masaryk University, 2009.
- [39] Needell, D.; Tropp, J. A.: CoSaMP: Iterative signal recovery from incomplete and inaccurate samples. Technická zpráva, California Institute of Technology, Pasadena, 2008.
- [40] Pati, Y.; Rezaifar, R.; Krishnaprasad, P.: Orthogonal matching pursuit: recursive function approximation with applications to wavelet decomposition. In *Conference Record of The Twenty-Seventh Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers*, 1993, ISSN 1058-6393, s. 40 –44.
- [41] Špiřík, J.: Algorithms for computing sparse solutions. In *Proceedings of the 17th conference STUDENT EEICT Volume 3*, 2011, s. 123–127.
- [42] Špiřík, J.: Performance analysis of Matching Pursuit algorithm modifications. In *Proceedings of the 13th International Conference on Research in Telecommunication Technologies*, 2011.
- [43] Špiřík, J.; Rajmic, P.; Veselý, V.: Reprezentace signálů: od bází k framům. *Elektrorevue – Internetový časopis*, 2010.
URL <http://elektrorevue.cz/cz/download/reprezentace-signalu--od-bazi-k-framum/>
- [44] Prestini, E.: *The Evolution of Applied Harmonic Analysis: Models of the Real World*. Springer, 2003, ISBN 9780817641252, 349 s.
- [45] Rauhut, H.; Romberg, J.; Tropp, J. A.: Restricted isometries for partial random circulant matrices. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, ročník In Press, 2011, ISSN 1063-5203.
- [46] Rudelson, M.; Vershynin, R.: Sparse reconstruction by convex relaxation: Fourier and Gaussian measurements. In *Information Sciences and Systems, 2006 40th Annual Conference on*, march 2006, s. 207–212, doi:10.1109/CISS.2006.286463.
- [47] Shepp, L. A.; Logan, B. F.: The Fourier Reconstruction of a Head Section. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, ročník 21, 1974: s. 21–43.

- [48] Starčuk, Z.; Krupa, P.; jr., Z. S.; aj.: 1H in vivo MR spektroskopie v klinické neurologii. *Neurologie pro praxi*, ročník 6, č. 3, 2005: s. 140–148, ISSN 13359592.
URL http://www.solen.sk/index.php?page=pdf_view&pdf_id=675&magazine_id=3
- [49] Strohmer, T.; Heath, R.: Grassmannian Frames with Applications to Coding and Communication. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, ročník 14, č. 3, 2003: s. 257–275.
- [50] Sun, T.; Kelly, K.: Compressive Sensing Hyperspectral Imager. In *Frontiers in Optics 2009/Laser Science XXV/Fall 2009 OSA Optics & Photonics Technical Digest*, Optical Society of America, 2009, str. CTuA5, doi: 10.1364/COSI.2009.CTuA5.
URL <http://www.opticsinfobase.org/abstract.cfm?URI=COSI-2009-CTuA5>
- [51] Tibshirani, R.: Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, ročník 58, č. 1, 1996: s. 267–288.
- [52] Tkáč, I.; Starčuk, Z.; Choi, I.; aj.: In vivo 1H NMR spectroscopy of rat brain at 1 ms echo time. *Magn Reson Med*, ročník 41, č. 4, 1999: s. 649–56.
- [53] Tropp, J. A.: Average-case analysis of greedy pursuit. *Proceedings of SPIE 5914*, 2005.
- [54] Tsaig, Y.: *Sparse solution of underdetermined linear systems: algorithms and applications*. Diplomová práce, Stanford university, 2007.
- [55] Vanhamme, L.; Sundin, T.; Hecke, P. V.; aj.: MR Spectroscopic Quantitation: a Review of Time-Domain Methods. In *NMR in Biomedicine*, ročník 14, 2001, s. 233–246.

SEZNAM SYMBOLŮ, VELIČIN A ZKRATEK

k	Boltzmannova konstanta
h	Planckova konstanta
\hbar	Redukovaná Planckova konstanta
s	Spinové kvantové číslo
\vec{S}	Moment hybnosti částice (spin)
$\vec{\mu}$	Magnetický moment
γ	Gyromagnetický poměr
\vec{B}	Indukce magnetického pole
ν	Larmorova frekvence
σ	Intenzita stínění magnetického pole
δ	Chemický posun
\vec{M}	Magnetizace
\vec{G}	Gradient magnetického pole
T_1	Relaxační čas T_1
T_2	Relaxační čas T_2
T_2^*	Relaxační čas T_2^*
NAA	N-acetylaspartát
Cho	Cholin
Cr	Kreatin
PCr	Forfokreatin
Lac	Laktát
mI	Myo-inositol
Glu	Glutamát
Gln	Glutamin

Glc	Glukóza
FID	Free Induction Decay – volné doznívání indukce
RF	Radiofrekvenční (pulz)
NMR	Nuclear Magnetic Resonance – nukleární magnetická rezonance
MRI	Magnetic Resonance Imaging – magnetická rezonance
MRS	Magnetic Resonance Spectroscopy – NMR spektroskopie
MRSI	Magnetic Resonance Spectroscopy Imaging – magnetické rezonanční spektroskopické zobrazování
SVS	Single Voxel Spectroscopy – jednovoxelová spektroskopie
SI	Spectroscopy Imaging – spektroskopické zobrazování
CSI	Chemical Shift Imaging
PRESS	Point Resolved Spectroscopy
STEAM	Stimulated Echo Acquisition Mode
CHESS	Chemical Shift Selective Imaging
SPIR	Selective Partial Inversion Recovery
STIR	Short Tau Inversion Recovery
SNR	Signal to Noise Ration – poměr signálu k šumu
FT	Fourierova transformace
DFT	Diskrétní Fourierova transformace
FFT	Fast Fourier transform – rychlá Fourierova transformace
RT	Radonova transformace
DCT	Discrete Cosine Transform – diskrétní kosinová transformace
ML	Maximum Likelihood – maximální věrohodnost
NLLS	Nonlinear Least Squares
VARPRO	Variable Projection for NLLS Problems

AMARES	Advanced Method for Accurate, Robust and Efficient Fitting
NSP	Null Space Property – vlastnost nulového prostoru
RIP	Restricted Isometry Property – vlastnost zeslabené isometrie
CS	Compressed Sensing – komprimované snímání
BP	Basis Pursuit
IRLS	Iterative Reweighted Least Squares
FOCUSS	Focal Underdetermined System Solver
MP	Matching Pursuit
OMP	Orthogonal Matching Pursuit
WMP	Weak Matching Pursuit
A*OMP	A* Orthogonal Matching Pursuit
CoSaMP	Compressive Sampling Matching Pursuit
PCA	Principle Component Analysis
SVD	Singular Value Decomposition
HSI	HyperSpectral Imaging
PPXA	Parallel Proximal Algorithm
MRSMP	Magnetic Resonance Spectroscopy Matching Pursuit

SEZNAM PŘÍLOH

A	MATLAB skripty	103
A.1	Vytvoření slovníku ze simulovaných dat	103
A.2	Vizualizace slovníku	103
A.3	Zobrazení Grammovy matice slovníku	104
A.4	Implementace algoritmu OMP	104
A.5	Implementace algoritmu MRSMP	105
A.6	Kvantifikace spektra pomocí algoritmu MRSMP	105
B	Obsah CD	108

A MATLAB SKRIPTY

A.1 Vytvoření slovníku ze simulovaných dat

```
function [] = build (sw)

path = './jmrui/';
metabolites = { 'choline', 'creatine', 'glutamate', 'glutamine', 'lactate', '←
    myoinositol', 'nacetylaspartate', 'phosphocreatine' };
data = cell(1, length(metabolites));

for ii = 1:length(metabolites)
    fprintf('Processing %s... ', metabolites{ii});
    run([path, metabolites{ii}, '.m']);
    len = SIZE(1);
    for jj = 1:SIZE(3)
        data{ii}(:, jj) = DATA((jj-1)*len+1:jj*len, 1) + ii*DATA((jj-1)*len+1:jj*←
            len, 2);
    end
    fprintf('done.\n');
end

larmor_freq = LARMOR_Hz{1,1};
ref_freq = REF_Hz{1,1};
spectral_width = sw;

fprintf('Saving data to output file... ');
save('metabolites.mat', 'data', 'len', 'metabolites', 'larmor_freq', 'ref_freq←
    ', 'spectral_width');
fprintf('done.\n');
```

A.2 Vizualizace slovníku

```
load('metabolites/metabolites.mat');

ax = linspace(larmor_freq - spectral_width/2, larmor_freq + spectral_width/2, ←
    1024);
ax = (ax - (larmor_freq + ref_freq)) / (larmor_freq + ref_freq) * 1000000;
T2 = 10;
for ii = 1:length(data)
    subplot(4, 2, ii);
    plot(ax, real(fftshift(fft(data{ii}(:,T2)))), '-r');
    hold on;
    plot(ax, imag(fftshift(fft(data{ii}(:,T2)))), '-b');
    %plot(ax, abs(fftshift(fft(data{ii}(:,T2)))), '-k');
    hold off;
    title(metabolites(ii));
    set(gca, 'xdir', 'reverse');
    xlim([min(ax) max(ax)]);
    xlabel('Chemical shift (ppm)');
    ylabel('Observables (-)');
end
```


A.3 Zobrazení Grammovy matice slovníku

```
load('metabolites/metabolites.mat');

A = [];
for ii = 1:length(data)
    A = [A data{ii}];
end
for ii = 1:size(A, 2)
    A(:,ii) = A(:,ii) / norm(A(:,ii));
end

figure(4);
imagesc(abs(A'*A));
axis square;
set(gca, 'XTick', 15 + 0:30:30*length(data));
set(gca, 'YTick', 15 + 0:30:30*length(data));
set(gca, 'XTickLabel', {'Cho', 'Cr', 'Glu', 'Gln', 'Lac', 'mI', 'NAA', 'PCr'})↵
;
set(gca, 'YTickLabel', {'Cho', 'Cr', 'Glu', 'Gln', 'Lac', 'mI', 'NAA', 'PCr'})↵
;
```

A.4 Implementace algoritmu OMP

```
function [ x ] = omp( A, y, thr )

r = y;
SS = [];

while (r'*r > thr && length(SS) < size(A, 2))
    [~, posZ] = max(abs(A'*r));
    SS = [SS, posZ(1)];
    r = y - A(:, SS) * pinv(A(:, SS)) * y;
end

x = zeros(size(A, 2), 1);
x(SS) = pinv(A(:, SS)) * y;

end
```

A.5 Implementace algoritmu MRSMP

```
function [ x, m ] = mrsmp( A, y, M, N )

r = y;
S = [];
R = 1:M*N;

for ii = 1:M
    [~, posZ] = max(abs(A(:,R)*r));
    S = sort([S, R(posZ(1))]);
    r = y - A(:,S) * pinv(A(:,S)) * y;

    pos = ceil(posZ(1)/N);
    R((pos-1)*N+1:pos*N) = [];
end

x = zeros(size(A, 2), 1);
x(S) = pinv(A(:,S)) * y;
m = abs(x(S));

end
```

A.6 Kvantifikace spektra pomocí algoritmu MRSMP

```
%%
load('metabolites/metabolites.mat');
M = 8;
N = 30;

ax = linspace(larmor_freq - spectral_width/2, larmor_freq + spectral_width/2, ←
    1024);
ax = (ax - (larmor_freq + ref_freq)) / (larmor_freq + ref_freq) * 1000000;

t = 0:len-1;

A = [];
for ii = 1:length(data)
    A = [A data{ii}];
end
for ii = 1:size(A, 2)
    A(:,ii) = A(:,ii) / norm(A(:,ii));
end

figure(1);

%%
T2 = 10;
noise = 0.01;

x = zeros(size(A, 2), 1);
m = zeros(M, 1);
for ii = 1:M
    m(ii) = rand();
```

```

    x((ii-1)*N+T2+randi(6)-3) = m(ii);
end

y = A * x;
y = y + noise*randn(size(y)) + noise*1i*randn(size(y));
%y = y + 0.05*cos(linspace(0,1,length(y)) * 2*pi * 50)';
disp(['SNR: ', num2str(10*log10(norm(y)/norm(A*x-y))), ' dB']);

%%
subplot(3, 2, 1);
plot(t, real(y), '-r');
hold on;
plot(t, imag(y), '-b');
hold off;
xlim([0 200]);
xlabel('Time (ms)');
ylabel('Amplitude (-)');
title('Original FID');

subplot(3, 2, 2);
plot(ax, real(fftshift(fft(y))), '-r');
hold on;
plot(ax, imag(fftshift(fft(y))), '-b');
%plot(ax, abs(fftshift(fft(y))), '-k');
hold off;
set(gca, 'xdir', 'reverse');
xlim([min(ax) max(ax)]);
xlabel('Chemical shift (ppm)');
ylabel('Observables (-)');
title('Original spectrum');

%%
[x_, m_] = mrsmp(A, y, M, N);
subplot(3, 2, 5);
stem(x, '-b', 'MarkerSize', 2);
hold on;
stem(abs(x_(1:240)), '-r', 'MarkerSize', 2);
hold off;
xlim([1 M*N]);
xlabel('Atom');
ylabel('Magnitude (-)');
title('Atoms');

%%
y_ = A * x_;

subplot(3, 2, 3);
plot(t, real(y_), '-r');
hold on;
plot(t, imag(y_), '-b');
hold off;
xlim([0 200]);
xlabel('Time (ms)');
ylabel('Amplitude (-)');
title('Reconstructed FID');

subplot(3, 2, 4);
plot(ax, real(fftshift(fft(y_))), '-r');
hold on;

```

```

plot(ax, imag(fftshift(fft(y_))), '-b');
%plot(ax, abs(fftshift(fft(y_))), '-k');
hold off;
set(gca, 'xdir', 'reverse');
xlim([min(ax) max(ax)]);
xlabel('Chemical shift (ppm)');
ylabel('Observables (-)');
title('Reconstructed spectrum');

%%
subplot(3, 2, 6);
bar([m m_], 'Group');
xlim([0.5 M+0.5]);
set(gca, 'XTickLabel', {'Cho', 'Cr', 'Glu', 'Gln', 'Lac', 'mI', 'NAA', 'PCr'})←
;
xlabel('Metabolite');
ylabel('Magnitude (-)');
title('Metabolites');

```

B OBSAH CD

Přiložené CD obsahuje následující adresářovou strukturu:

- `bib` – použitá literatura,
- `src` – zdrojové kódy v prostředí MATLAB:
 - `metabolites`
 - * `jmrui` – simulované odezvy jednotlivých metabolitů vyexportované z programu jMRUI,
 - * `build.m` – skript umožňující vytvoření slovníku ze simulovaných dat,
 - * `metabolites.mat` – vytvořený slovník,
 - `pca` – příklad použití PCA,
 - `mrsi.m` – konstrukce a testování měřicí matice pro komprimované snímání v MRSI,
 - `mrsmp.m` – implementace algoritmu MRSMP,
 - `omp.m` – implementace algoritmu OMP,
 - `test.m` – kvantifikace spekter pomocí MRSMP,
 - `visualize.m` – vizualizace slovníku,
- `thesis` – technická zpráva (zdrojové soubory L^AT_EX).